

Міністерство освіти і науки України
Південноукраїнський національний педагогічний
університет імені К. Д. Ушинського

Я. Д. Клубіс, Н. М. Шкатуляк

ДЕЯКІ ПИТАННЯ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

(НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК ДЛЯ СТУДЕНТІВ ТА МАГІСТРАНТІВ
ФІЗИЧНИХ СПЕЦІАЛЬНОСТЕЙ)

Одеса 2018

ЗМІСТ

Передмова	3
РОЗДІЛ I. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ ТА ДЕЯКІ МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ РІШЕННЯ ЇЇ ПРИКЛАДНИХ ЗАДАЧ	4
§1. Оператори. Діраківський формалізм	4
§2. Поняття про теорію представлень. Матриці	11
§3. Матриці Паулі	22
§4. Гармонічний осцилятор	29
§5. Оператори знищення та народження	35
§6. Теорія збурень	37
РОЗДІЛ II. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА ТА ЙОГО ЗАСТОСУВАННЯ ДО РІШЕННЯ ДЕЯКИХ ОДНОМІРНИХ ЗАДАЧ. ТОТОЖНІ ЧАСТИНКИ	45
§7. Повне рівняння Шредінгера	45
§8. Гармонічне періодичне збурення. Матриця густини	50
§9. Проходження частинки через потенційний бар'єр	56
§10. Системи тотожних частинок	64
§11. Взаємодія електромагнітного випромінювання з атомною системою ...	71
РОЗДІЛ III. ДЕЯКІ ПИТАННЯ КВАНТОВОЇ ЕЛЕКТРОНІКИ ТА КВАНТОВОЇ МАКРОФІЗИКИ	87
§12. Рівняння руху зарядженої мікрочастинки у довільному електромагнітному полі	87
§13. Метод вторинного квантування	91
§14. Дворівневі системи	99
§15. Надпровідність	111
§15.1 Основні експериментальні факти.....	111
§15.2 Електродинаміка надпровідників	116
§15.3 Надпровідність – квантове явище	118
ЗАДАЧІ І ВПРАВИ	137
ПИТАННЯ ДЛЯ САМОКОНТРОЛЮ	217
ЛІТЕРАТУРА	219

Передмова

Цей посібник адресовано студентам та магістрантам фізичних спеціальностей, які прослухали курс квантової механіки за програмою педагогічних університетів. Посібник переслідує мету розширити, можливості використовувати методи квантової механіки в науково-дослідній роботі. До нього включено такі питання, більш глибоке проникнення в які, дозволить освоїти основні принципи квантової механіки і розуміти рішення деякої кількості її прикладних задач. Це стосується її математичних методів, яким і присвячена перша частина посібника.

Ми припускаємо, природно, що основи квантової механіки засвоєні студентами, які прослухали обов'язковий курс теоретичної фізики. Але глибоке вивчення квантової механіки вимагає великого фізичного і психологічного напруження протягом досить великого проміжку часу. Існує великий перелік літератури (див. Література), за допомогою якої можна досягти цієї мети, якщо завдання науково-дослідної роботи вимагають серйозного розуміння квантової механіки і вміння нею користуватися.

Наш посібник не може розглядатись як підручник, проте він може бути корисним доповненням до прослуханого курсу.

У другій та третій частинах посібника порушено такі важливі питання квантової механіки, як матриця густини, метод вторинного квантування, взаємодія атомів з електромагнітним полем, деякі питання квантової теорії твердого тіла, квантової статистики та ін.

Автори

РОЗДІЛ I. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ ТА ДЕЯКІ МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ РІШЕННЯ ЇЇ ПРИКЛАДНИХ ЗАДАЧ

§1. Оператори. Діраківський формалізм

У квантовій механіці, як відомо, широко використовується певний клас математичних операторів, короткі відомості про основні визначення і теореми цієї теорії ми нагадаємо.

Оператором, називають певний набір правил, за допомогою яких з будь-якої функції можна побудувати іншу цілком певну функцію. Розглянемо, наприклад, оператор

$$\hat{A} = 1 + \frac{\partial}{\partial x}.$$

Він перетворює довільну функцію $f(x)$ у нову функцію:

$$\hat{A}f(x) = f(x) + \frac{\partial f}{\partial x}. \quad (1.1)$$

При розгляді традиційних питань квантової механіки найчастіше зустрічаються оператори, що містять величини $\vec{r}$, $\vec{\nabla}$, тобто просторові координати і похідні по ним, іншими словами, оператори, що діють в просторі функцій, що залежать від $\vec{r}$.

Особливе місце в квантовій механіці займають також лінійні оператори, тобто такі оператори, які задовольняють для функцій $f(x)$ і $g(x)$ і для будь-якого числа c співвідношенням

$$\hat{A}cf(x) = c\hat{A}f(x),$$

$$\hat{A}[f(x) + g(x)] = \hat{A}f(x) + \hat{A}g(x).$$

Сумою операторів $\hat{A} + \hat{B}$ називають оператор, дія якого на довільну функцію $f(x)$ дорівнює сумі дій на неї окремих операторів, тобто

$$(\hat{A} + \hat{B})f(x) = \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x).$$

Добутком операторів $\hat{A}\hat{B}$ називають оператор, дія якого на довільну функцію $f(x)$ дорівнює дії оператора $\hat{A}$ на результат дії оператора $\hat{B}$ на функцію $f(x)$, тобто

$$(\hat{A}\hat{B})f(x) = \hat{A}(\hat{B}f(x)).$$

Часто буває, що $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Оператор $\hat{C} = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ називають комутатором операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$. Якщо $\hat{C} = 0$, то оператори $\hat{A}$ і $\hat{B}$ називають комутуючими, якщо $\hat{C} \neq 0$, то – некомутовуючими.

Оператори, що відповідають фізичним величинам у квантовій механіці, мають наступні властивості

$$\int f^*(\hat{A}g) d^3\vec{r} = \int (\hat{A}f)^* g d^3\vec{r}, \quad (1.2)$$

де $f(\vec{r})$ і $g(\vec{r})$ – дві довільні функції.

При цьому передбачається, що функції $f(\vec{r})$ і $g(\vec{r})$ при $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ прагнуть до нуля так само швидко, як і хвильові функції, що описують фізичний стан квантової системи. Якщо в інтегралі не вказані межі інтегрування, мається на увазі, що він береться по всій області завдання функцій.

Оператор, що володіє властивістю (1.2), називається ермітовим. Для будь-якого даного лінійного оператора $\hat{A}$ завжди існує інший оператор $\hat{B}$, який називають ермітово спряженим оператором оператору $\hat{A}$:

$$\int f^*(\vec{r}) \hat{A}g(\vec{r}) d^3\vec{r} = \int [\hat{B}f(\vec{r})]^* g(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (1.3)$$

Для ермітово спряженого оператора використовують позначення

$$\hat{B} = \hat{A}^+.$$

Таким чином, формулу (1.3) можна записати у вигляді

$$\int f^*(\vec{r}) \hat{A}g(\vec{r}) d^3\vec{r} = \int [\hat{A} + f(\vec{r})]^* g(\vec{r}) d^3\vec{r}. \quad (1.4)$$

Порівнюючи (1.4) з (1.2) бачимо, що оператор $\hat{A}$ ермітовий у тому випадку, коли ермітово спряжений йому оператор збігається з ним самим.

Іншими словами, будь-який ермітовий оператор $\hat{A}$ задовольняє умові

$$\hat{A}^+ = \hat{A}.$$

Тому ермітові оператори є спряженими.

З кожним лінійним оператором $\hat{A}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right)$ можна зв'язати набір чисел a_n і набір функцій $u_n(x)$, які задовольняють рівнянню

$$\hat{A}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right) u_n(x) = a_n u_n(x) \quad (1.5)$$

Числа a_n називаються власними числами оператора $\hat{A}$, а функції $u_n(x)$ – його власними функціями. Набір чисел a_n (спектровласних чисел, або власних значень) може бути дискретним або безперервним.

Розглянемо, наприклад, оператор $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Щоб знайти його власні числа і власні функції, потрібно вирішити рівняння

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} u_p(x) = p u_p(x) \quad (1.6)$$

Рішенням рівняння (1.6) є функція

$$u_p(x) = e^{ipx/\hbar}, \quad (1.7)$$

причому число p може приймати будь-які значення, включаючи комплексні числа.

Однак, якщо додатково до рівняння (1.6) вимагати виконання граничної умови, яка полягає в тому, що функція $u_p(x)$ просторово періодична з періодом L , то отримаємо наступне обмеження на вибір чисел p :

$$\frac{p}{\hbar} = n \frac{2\pi}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.8)$$

Таким чином, для власних функцій отримаємо формулу

$$u_n(x) = e^{in(2\pi/L)x}. \quad (1.9)$$

Тепер власні числа приймають тільки дискретні дійсні значення.

Це важливо. Як бачимо, власні числа і власні функції визначаються не тільки математичною процедурою оператора, але і граничними умовами, що накладаються на функції.

Узагальнимо тепер очевидним чином рівняння (1.5) на тривимірний простір, зробивши заміну

$$-i \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow -i \vec{\nabla} \equiv -i \left(\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (1.10)$$

де $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ - орти координатних осей.

Рівняння для відшукування власних чисел і власних функцій, аналогічне (1.6), має вигляд

$$-i\hbar\vec{\nabla}u_{lmn}(\vec{r}) = \vec{a}_{lmn}u_{lmn}(\vec{r}), \quad (1.11)$$

або

$$-i\hbar\left(\vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)u_{lmn}(\vec{r}) = \vec{a}_{lmn}u_{lmn}(\vec{r}), \quad (1.12)$$

де $\vec{a}_{lmn}$ – власні числа, які є зараз векторами.

Припустимо, що власні функції u_{lmn} можна шукати у вигляді добутків

$$u_{lmn}(x, y, z) = f_l(x)g_m(y)p_n(z) \quad (1.13)$$

Підставляючи (1.13) в (1.12), приходимо до трьох самостійних рівнянь

$$\frac{\partial f_l}{\partial x} = ia_l f_l(x), \quad \frac{\partial g_m}{\partial y} = ia_m g_m, \quad \frac{\partial p_n}{\partial z} = ia_n p_n, \quad (1.14)$$

в яких a_l , a_m і a_n – деякі постійні числа. Таким чином, можливе рішення рівнянь (1.14) має вигляд

$$u_{lmn} = Ce^{i(a_l x + a_m y + a_n z)}, \quad (1.15)$$

де C – довільна постійна.

Підставляючи (1.15) в (1.12), приходимо до рівняння

$$-i\hbar\vec{\nabla}u_{lmn}(x, y, z) = \hbar(\vec{i}a_l + \vec{j}a_m + \vec{k}a_n)u_{lmn}, \quad (1.16)$$

з якого випливає, що власні числа рівняння (1.11) даються виразами

$$\vec{a}_{lmn} = \hbar(\vec{i}a_l + \vec{j}a_m + \vec{k}a_n) \quad (1.17)$$

Якщо вимагати, щоб власні функції u_{lmn} задовольняли періодичним граничним умовам по x, y і z з періодами A, B і C власно, то отримаємо аналогічну (1.8) формулу

$$\vec{a}_{lmn} = \hbar\left(\vec{i}\frac{l2\pi}{A} + \vec{j}\frac{m2\pi}{B} + \vec{k}\frac{n2\pi}{C}\right), \quad (1.18)$$

в якій l, m, n – довільні цілі числа, незалежно пробігають значення $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ Формула (1.18) показує, що власними числами є вектори, які мають дійсні дискретні компоненти.

Наведемо без доведення наступну теорему:

Любі дві власні функції u_n і u_m довільного ермітового оператора $\hat{A}$ задовольняють умові

$$\int u_n^*(\vec{r})u_m(\vec{r})d^3\vec{r} = 0 \quad (m \neq n), \quad (1.19)$$

якщо тільки не рівні один одному відповідні або власні числа a_n і a_m Власні

числа a_n будь-якого ермітового оператора $\hat{A}$ дійсні.

Коли дві функції u_n і u_m задовольняють умові (1.19) їх називають ортогональними один одному.

Якщо є дві (або більше) власні функції, що відповідають одному і тому ж власному значенню (тобто $a_m = a_n$), то в такому випадку завжди можна вибрати лінійні комбінації функцій u_n , які будуть ортогональні один одному.

Оскільки рівняння виду (1.5) для відшукування власних функцій і власних чисел лінійні (тому що вони складені для лінійних операторів), власні функції з цих рівнянь можна знайти тільки з точністю до довільних постійних множників. Ці множники визначають, виходячи з додаткової умови

$$\int u_n^* u_n d^3\vec{r} = 1, \quad (1.20)$$

яке називається умовою нормування. Відповідні множники називають нормувальними константами або множниками.

Стосовно до квантової механіки умова (1.20) пов'язана з імовірнісним (статистичним) змістом хвильової функції ψ , яка зазвичай є власною функцією відповідних операторів квантової механіки:

$$\int \psi_n^* \psi_n d^3\vec{r} = \int |\psi_n|^2 d^3\vec{r} = 1. \quad (1.21)$$

Умови ортогональності (1.19) і нормування (1.20) можна записати у вигляді однієї умови, так званої умови ортонормованості:

$$\int \psi_n^* \psi_m d^3\vec{r} = \delta_{nm}, \quad (1.22)$$

де δ_{nm} – символ Кронекера, $\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & n \neq m \end{cases}$.

Важлива властивість нескінченного набору всіх власних функцій $u_n(\vec{r})$ довільного ермітового оператора $\hat{A}$ (який задовольняє рівнянню $\hat{A}u_n = a_n u_n$) полягає в тому, що по ним можна розкласти довільну функцію $\psi(\vec{r})$ розглянутого функціонального простору, тобто представити її у вигляді

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n b_n u_n(\vec{r}). \quad (1.23)$$

Існують певні обмеження, що накладаються на функції $\psi(\vec{r})$, зокрема, стосовно квантової механіці, враховуючи їх імовірнісний сенс, вони повинні

бути кінцеві, безперервні і однозначні.

Коефіцієнти розкладання b_i в (1.23) (взагалі кажучи, комплексні числа) можна знайти, множачи (1.23) на функції $u_i^*(\vec{r})$ і інтегруючи.

Отримуємо співвідношення

$$\int u_i^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d^3\vec{r} = \sum_n b_n \int u_i^*(\vec{r})u_n(\vec{r})d^3\vec{r}.$$

Використовуючи умову (1.22), виводимо звідси безпосередньо формулу для коефіцієнтів розкладу (1.23)

$$b_i = \int u_i^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d^3\vec{r}. \quad (1.24)$$

З точки зору квантової механіки, коефіцієнти b_n в розкладі (1.23) потрібно трактувати як амплітуди імовірності, з якої стани $u_n(\vec{r})$ представлені у суперпозиційному стані $\psi(\vec{r})$.

В деякому абстрактному сенсі можна уявити собі, що коефіцієнти b_i є «проекціями» функції $\psi(\vec{r})$ на функції $u_i(\vec{r})$. Таким чином, набір всіх функцій $u_n(\vec{r})$ можна осмислити як набір «одиничних базисних векторів» в деякому нескінченному просторі. Саму функцію $\psi(\vec{r})$ можна вважати деяким «вектором» в цьому просторі, а формулу (1.23) розглядати як формулу розкладання «вектора» по «базисним одиничним векторам» $u_n(\vec{r})$.

Дірак запропонував зручні позначення для інтегралів від хвильових функцій, які постійно зустрічаються в квантовій механіці. Ці позначення дуже спрощують роботу з зазначеними інтегралами і дозволяють без труднощів формально проводити багато важливих доказів.

Розглянемо, наприклад, інтеграл

$$\int f^* g d^3\vec{r},$$

де f і g – дві функції, що описують квантові стани. Використовуючи діраківські позначення, представимо цей інтеграл кутовими дужками з вертикальною лінією між значками функцій:

$$\int f^* g d^3\vec{r} = \langle f | g \rangle. \quad (1.25)$$

Відповідно до англійського слова bracket (дужка) Дірак запропонував називати індивідуальні функції f і g в (1.25) «бра-вектором» і «кет-вектором» і позначати наступним чином:

$$f^* \rightarrow \langle f|,$$

$$g \rightarrow |g\rangle.$$

Домовимося позначати інтеграл (1.25) бра- та кет-векторами, записаними один з одним.

Результат дії оператора $\hat{A}$ на функцію g в діраківських позначеннях записують так:

$$\hat{A}g \rightarrow \hat{A}|g\rangle,$$

а тому маємо простий запис

$$\int f^* \hat{A}g d^3\vec{r} \rightarrow \langle f|\hat{A}|g\rangle.$$

Умови ортонормування (1.22) у діраківських позначеннях записується у вигляді

$$\langle u_n|u_m\rangle \equiv \langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \quad (1.26)$$

а «проекція» (1.24) функції $\psi(\vec{r})$ на функцію $u_i(\vec{r})$ – у вигляді

$$b_i = \langle u_i|\psi\rangle. \quad (1.27)$$

Розклад (1.23) довільної функції $|\psi\rangle$, який описує квантовий стан, тепер представляється в такий спосіб:

$$|\psi\rangle = \sum_n [\langle n|\psi\rangle] |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle. \quad (1.28)$$

Формальна інтерпретація за Діраком формули (1.28) полягає в наступному. Діючи на довільну функцію стану $|\psi\rangle$ оператором

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{I}, \quad (1.29)$$

де $\hat{I}$ – позначення одиничного оператора. (Одиничним оператором називають оператор, який залишає незмінною будь-яку функцію, на яку він діє, тобто $\hat{I}f = f$, де f – довільна функція). Нагадаємо також, що набір функцій $|n\rangle$ – це повний набір ортонормованих функцій.

З метою наочності зручності діраківських позначень запишемо, наприклад, в них формули (1.3) і (1.4)

$$\langle f|\hat{A}g\rangle \equiv \langle f|\hat{A}|g\rangle = \langle \hat{B}f|g\rangle, \quad (1.30)$$

$$\langle f|\hat{A}|g\rangle = \langle \hat{A}^+ f|g\rangle. \quad (1.31)$$

§2. Поняття про теорію представлень. Матриці

У квантовій механіці існують, як відомо, два основні підходи – метод диференціального рівняння Шредінгера (хвильова механіка) і матричний метод Гейзенберга (матрична механіка). Ці методи формально еквівалентні і часто використовуються одночасно.

Перехід від одного методу до іншого тісно пов'язаний з матричним представленням операторів, а останній природно виникає, коли потрібно перейти від одного уявлення хвильової функції до іншого, тобто від функції від одних аргументів до функції від інших аргументів.

Ми введемо зараз поняття про теорії зображень, а потім дамо короткий огляд основ матричної алгебри, вважаючи, що студенти знайомі з основними визначеннями і операціями матричного обчислення.

Основною особливістю, що характеризує квантову механіку, є те, що для неї одночасне вживання ряду класичних корпускулярних величин (координати і спряженого імпульсу (x і p_x), кінетичної і потенційної енергії (T і U), будь-яких двох компонент кінетичного моменту (наприклад, M_x і M_y) і т.п.) втрачає будь-який сенс, тому що в природі не реалізуються такі стани, в яких наведені пари величин існували б одночасно.

У §1 ми говорили про стан, що зображений хвильовою функцією $\psi(\vec{r})$ (для простоти будемо вживати лише одну координату x). Виникає питання: чи не можна описати стан ансамблю частинок так, щоб хвильова функція була функцією імпульсу p ($p = p_x$)?

У першому випадку будемо говорити: стан дано в " x "-представленні, у другому: стан дано в " p "-представленні.

Нехай дана хвильова функція $\psi(x, t)$ (" x "-представлення). Розкладемо цю функцію за власними функціями оператора імпульсу $\psi_p(x)$ (тобто в інтеграл Фур'є), тоді

$$\psi(x, t) = \int c(p, t) \psi_p(x) dp. \quad (2.1)$$

Формула (2.1) є фактично узагальненням розкладання (1.23)

$$c(p, t) = \int \psi(x, t) \psi_p^*(x) dx. \quad (2.2)$$

Якщо ми знаємо амплітуди $c(p, t)$, то ми знаємо і $\psi(x, t)$, завдання $c(p, t)$ цілком визначає $\psi(x, t)$. Тому $c(p, t)$ можна розглядати як хвильову функцію, аргументів якої є імпульс p . Ця функція зображує фізично той же стан частинки, що і функція $\psi(x, t)$.

Формулу (2.1) слід розглядати як перетворення хвильової функції від " p "- представлення до " x "- представлення, а (2.2) – як перетворені від " x "- представлення до " p "- представлення.

Розглянемо тепер представлення стану, коли за незалежну змінну взята енергія частинки E . Нехай, для визначеності, E має дискретний спектр значень: $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$. Відповідні власні функції позначимо через $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_n(x), \dots$. Хвильову функцію $\psi(x, t)$ ми можемо представити у вигляді ряду (див. (1.23)).

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(x), \quad (2.3)$$

$$c_n(t) = \int \psi(x, t) \psi_n^*(x) dx. \quad (2.4)$$

Завдання всіх амплітуд $c_n(t)$ цілком визначає $\psi(x, t)$. Обернено, завдання $\psi(x, t)$ визначає $c_n(t)$. Тому сукупність усіх $c_n(t)$ можна розглядати як хвильову функцію, яка описує той же стан, що і $\psi(x, t)$, але в представленні, в якому за незалежну змінну взята енергія E .

З цієї точки зору, формула (2.3) є перетворення хвильової функції від " E "- представлення до " x "- представлення. (Зазвичай читають так: «координатне представлення», «імпульсне представлення», «енергетичне представлення»). Формула (2.4) є формула зворотного перетворення. З формул (2.1)-(2.4) випливає, що ймовірність знайти яке-небудь значення незалежної змінної дорівнює квадрату модуля хвильової функції у відповідному представленні. Справді, нехай є якийсь стан $\psi(x, t)$, тоді ймовірність $dW(x, t)$ знайти значення координати, що лежить між x і $x + dx$, буде

$$dW(x, t) = |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (2.5)$$

Імовірність $dW(p, t)$ знайти імпульс p і $p + dp$ буде

$$dW(p, t) = |c(p, t)|^2 dp. \quad (2.6)$$

Імовірність знайти енергію $W(E_n, t)$ яка дорівнює E_n буде

$$W(E_n, t) = |c_n(E_n, t)|^2. \quad (2.7)$$

Якщо знайдений спосіб зображення станів ψ в різних незалежних змінних, то природно потрібно знайти ще й спосіб представлення операторів в тих же змінних. У §1 ми розглядали оператор $\hat{A}(x, \frac{\partial}{\partial x})$, тобто оператор $\hat{A}$ в " x "- представленні. Замінивши зараз позначення $\hat{A}(x, \frac{\partial}{\partial x})$, як це частіше прийнято в квантовій механіці, на позначення $\hat{L}(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x)$ ($-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x$ – оператор x – компоненти імпульсу), запишемо загальну формулу, яка вказує на те, що оператор $\hat{L}$, діючи на функцію $\psi(x)$, приводить до нової функції $\varphi(x)$

$$\hat{L}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \psi(x) = \varphi(x). \quad (2.8)$$

Знайдемо тепер оператор $\hat{L}$ в енергетичному уявленні, вважаючи, що енергія має дискретний спектр значень E_n . Відповідні власні функції нехай будуть $\psi_n(x)$. Тоді функції ψ та φ можна представити у вигляді

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad (2.9)$$

$$\varphi(x) = \sum_n b_n \psi_n(x). \quad (2.10)$$

Сукупність $c_n \in \psi$ в " E "- представленні, а сукупність $b_n \in \varphi$ в цьому ж представленні. Оператор $\hat{L}$ переводить ψ в нову функцію φ , а разом з тим і c_n в нові амплітуди b_n . Якщо ми знайдемо оператор, який би безпосередньо виражав b_n через c_n , то тим самим ми знайдемо оператор $\hat{L}$ в " E "- представленні. З цією метою підставимо (2.9) і (2.10) в (2.8). Отримаємо

$$\sum_n c_n \hat{L} \psi_n(x) = \sum_n b_n \psi_n(x). \quad (2.11)$$

Помноживши (2.11) на $\psi_m^*(x)$ і інтегруючи по всіх x , отримаємо в силу (1.22)

$$b_m = \sum_n L_{mn} c_n, \quad (2.12)$$

де

$$L_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{L} \psi_n(x) dx. \quad (2.13)$$

Знаючи всі величини L_{mn} , ми можемо за формулою (2.12) знайти всі амплітуди b_n (функцію φ в "E"- уявленні) по заданих c_n (тобто по функції ψ в "E"- представленні). Тому сукупність всіх величин L_{mn} слід розглядати як оператор $\hat{L}$ в "E"- представленні. Сукупність величин L_{mn} становить матрицю, а самі величини L_{mn} – її матричні елементи. У діраківських позначеннях матричні елементи (2.13) виглядають як

$$L_{mn} = \langle m | \hat{L} | n \rangle, \text{ або детальніше } L_{mn} = \langle E_m | \hat{L} | E_n \rangle \quad (2.14)$$

Звичайне зображення матриці, як відомо, має вигляд

$$L = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{13} & \dots & L_{1n} & \dots \\ L_{21} & L_{22} & L_{23} & \dots & L_{2n} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{m1} & L_{m2} & L_{m3} & \dots & L_{mn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad (2.15)$$

Елемент kl матриці AB , що є добутком матриць A і B , обчислюється за формулою

$$(AB)_{kl} = \sum_m A_{km} B_{ml}, \quad (2.16)$$

так що, наприклад,

$$(ABC)_{kl} = \sum_m \sum_n A_{km} B_{mn} C_{nl}. \quad (2.16')$$

Одиничною називається така квадратна матриця I , добуток якої з будь-якою іншою квадратною матрицею тієї ж розмірності дає ту ж саму матрицю, тобто

$$BI = B, IB = B. \quad (2.17)$$

Звідси слідує що $I_{kl} = \delta_{kl}$.

Зворотною матрицею B^{-1} для квадратної матриці B називається така матриця, яка, будучи помноженою на цю матрицю дає одиничну матрицю; інакше кажучи, для будь-якої матриці B , для якої існує зворотна матриця, є співвідношення

$$B^{-1}B = BB^{-1} = I \quad (2.18)$$

Зворотна матриця добутку матриць дорівнює добутку зворотних матриць взятих в зворотному порядку

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}. \quad (2.19)$$

Елементи зворотної матриці A^{-1} розраховуються за правилом

$$(A^{-1})_{kl} = \frac{\text{алгебраичне доповнення } A_{lk}}{\text{детермінант } A} \quad (2.20)$$

Ермітово спряженою для матриці A матрицею, що позначається A^+ , називається така матриця, елементи якої обчислюються за правилом

$$(A^+)_{kl} = A_{lk}^*, \quad (2.21)$$

де зірочка $*$ є звичайним комплексним сполученням.

Матриця називається ермітовою, коли ермітово спряжена їй матриця збігається з нею самою, тобто коли

$$A^+ = A. \quad (2.22)$$

Використовуючи (2.21) рівність (2.22) можна записати як рівність матричних елементів

$$A_{kl} = A_{lk}^*. \quad (2.23)$$

Для ермітової матриці операція транспонування (перестановки стовпців з рядками) еквівалентна взяттю комплексного сполучення (для кожного елемента береться комплексно-сполучена величина). Ермітовим, отже, можуть бути тільки квадратні матриці.

З (2.23) безпосередньо випливає, зокрема, що матричні елементи A_{kk} ермітової матриці, що лежать на її головній діагоналі, є дійсними числами.

Унітарною називається квадратна матриця, для якої ермітово спряжена їй матриця дорівнює зворотній їй матриці, тобто

$$A^+ = A^{-1} \quad (2.24)$$

З (2.2) безпосередньо випливає, що для будь-якої унітарної матриці A виконується співвідношення $AA^+ = I$. Для матричних елементів унітарної матриці має місце співвідношення

$$(AA^+)_{kl} = \sum_n A_{kn} A_{nl}^+ = \sum_n A_{kn} A_{ln}^* = \delta_{kl} \quad (2.25)$$

Тут ми використовували формулу (2.21).

Зараз з'ясуємо, як виглядає визначення середнього значення і спектра величини, що подається оператором в матричній формі. Середнє значення

величини, зображеної оператором $\hat{L}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x\right)$, в стані $\psi(x, t)$ дається, як відомо, формулою

$$\bar{L} = \int \psi^* \hat{L} \psi dx. \quad (2.26)$$

Ця формула може бути легко переписана в матричній формі. Нехай $\psi_n(x)$ – власна функція, що належить n -му власному значенню величини, взятої за незалежну змінну (наприклад, енергії). Представимо $\psi(x, t)$ і $\psi^*(x, t)$ у вигляді ряду

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x, t), \quad (2.27)$$

$$\psi^*(x, t) = \sum_m c_m^* \psi_m^*(x, t). \quad (2.28)$$

Подставимо (2.27) и (2.28) в (2.26). Получимо

$$\bar{L} = \sum_n \sum_m c_m^* c_n \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dx,$$

тобто

$$\bar{L} = \sum_n \sum_m c_m^* L_{mn} c_n \quad (2.29)$$

Це і є вираз для середнього значення $\bar{L}$ величини L , якщо оператор $\hat{L}$, який представляє її дано в матричній формі. Розглянемо сукупність c_n як матрицю ψ з одним стовпцем

$$\psi = \begin{vmatrix} c_1 & 0 & 0 & \dots \\ c_2 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_n & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}, \quad (2.30)$$

а сукупність c_m^* – як ермітово спряжену матрицю ψ^+ з одним рядком

$$\psi^+ = \begin{vmatrix} c_1^* & c_2^* & \dots & c_n^* & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (2.31)$$

За правилами матричного множення ми можемо (2.29) записати у вигляді

$$\bar{L} = \psi^+ L \psi \quad (2.32)$$

Спектр величини і власні функції оператора $\hat{L}$ який її представляє визначаються з рівняння $\hat{L}\psi_L = L\psi_L$. Підставляючи в це рівняння ψ з (2.27),

помножуючи зліва на ψ_m^* і інтегруючи по x , отримаємо

$$\sum_n c_n \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dx = L \sum_n c_n \int \psi_m^* \psi_n dx$$

або

$$\sum_n L_{mn} c_n = L c_m. \quad (2.33)$$

Це нескінченна система лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь для визначення амплітуд власної функції c_n і власних значень L_n оператора $\hat{L}$.

Як відомо з алгебри, система однорідних лінійних рівнянь тільки в тому випадку має рішення, відмінне від нуля, коли визначник, складений з коефіцієнтів рівнянь, переходить в нуль. У нашому випадку цей визначник має нескінченне число рядків і стовпців

$$\begin{vmatrix} L_{11} - L & L_{12} & L_{13} & \dots & L_{1n} & \dots \\ L_{21} & L_{22} - L & L_{23} & \dots & L_{2n} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{n1} & L_{n2} & L_{n3} & \dots & L_{nn} - L & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0 \quad (2.34)$$

Це рівняння накладає обмеження на можливі значення L . Воно є рівнянням нескінченно високого ступеня L (трансцендентним) і має нескінченно велике число коренів: $L = L_1, L_2, \dots, L_n, \dots$ в алгебрі доведено, що корені такого рівняння обов'язково дійсні. Сукупність значень L_α , при яких можна вирішити систему рівнянні (2.33) і буде сукупністю власних значень оператора $\hat{L}$.

Перехід від рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (2.35)$$

де $\hat{H}$ – оператор Гамільтона, до матричної форми цього рівняння може бути здійснений якщо розкласти $\psi(x, t)$ в ряд за власними функціями $\psi_n(x)$ будь-якого оператора. Підставляючи в (2.35) $\psi(x, t)$ у вигляді ряду $\psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(x)$, помножуючи зліва на $\psi_m^*(x)$ і інтегруючи по x , знаходимо

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \sum_n H_{mn} c_n, \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.36)$$

$$\text{де } H_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{H} \psi_n(x) dx - \quad (2.37)$$

матричний елемент гамільтоніана $\hat{H}$. Це рівняння по заданих в початковий момент $c_n(0)$ (тобто по $\psi(x, 0)$) визначає $c_n(t)$ (тобто по $\psi(x, t)$).

Нехай $\hat{H}$ є оператор повної енергії. Візьмемо в якості функцій $\psi_n(x)$ власні функції оператора $\hat{H}$. Тоді $c_n(t)$ суть амплітуди стаціонарних станів, а матриця H_{mn} буде діагональною:

$$H_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{H} \psi_n(x) dx = E_n \delta_{mn} \quad (2.38)$$

Підставляючи ці значення H_{mn} в (2.36), знаходимо рівняння Шредінгера для цього випадку:

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = E_n c_m. \quad (2.39)$$

Звідси

$$c_m(t) = c_m(0) e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}}, \quad (2.40)$$

тобто амплітуди стаціонарних станів гармонійно залежать від часу.

Рівняння Шредінгера в матричній формі можна застосувати до обчислення похідної оператора за часом. Диференціюючи за часом (2.29), використовуючи (2.36), з огляду на самоспряженість оператора $\hat{H}$ ($H_{mk}^* = H_{km}$), неважко отримати

$$\frac{d(\bar{L})}{dt} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} = \sum_m \sum_n c_m^* \left(\frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L})_{mn} \right) c_n, \quad (2.41)$$

$$\text{де } \frac{1}{i\hbar} (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L})_{mn} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k (L_{mk} H_{kn} - H_{mk} L_{kn}) = [\hat{H}, \hat{L}]_{mn} \quad (2.42)$$

є матричний елемент квантової дужки Пуассона. Порівняно з формулою для середнього (2.29) маємо, що матричні елементи оператора $\frac{d\hat{L}}{dt}$ є

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt} \right)_{mn} = \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{L}]_{mn}. \quad (2.43)$$

В операторній алгебрі показано, що

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L}) \psi dx. \quad (2.44)$$

Введено позначення

$$[\hat{H}, \hat{L}] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L}), \quad (2.45)$$

назване квантовою дужкою Пуассона, так що (2.44) може бути записано у вигляді

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + [\bar{H}, \bar{L}]. \quad (2.46)$$

Видно, що похідна за часом від середнього значення $\bar{L}$ є середнє від деякої величини, зображеної оператором

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{L}].$$

Тому цей оператор слід прийняти за оператор $\frac{d\hat{L}}{dt}$ похідної за часом $\frac{dL}{dt}$ від величини L , яка зображена оператором $\hat{L}$

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{L}]. \quad (2.47)$$

Ми бачимо, що формули (2.41) і (2.43) являють собою формули (2.44) і (2.47) відповідно в матричному представленні.

Розглянемо важливий окремий випадок. Нехай гамільтоніан $\hat{H}$ не залежить від часу, так що $\hat{H}$ є оператор повної енергії. Візьмемо спеціально "E"-представлення. Тоді матриця $\hat{H}$ буде діагональною (нагадаємо, що у власному представленні всяка величина зображується діагональною матрицею):

$$H_{kn} = E_k \delta_{kn}, \quad H_{mk} = E_m \delta_{mk}.$$

Припускаючи ще, що оператор $\hat{L}$ не залежить від часу, ми отримаємо з (2.42) і (2.43)

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt}\right)_{mn} = \frac{1}{i\hbar} (E_n - E_m) L_{mn},$$

або

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt}\right)_{mn} = i\omega_{mn} L_{mn}, \quad (2.48)$$

$$\text{де } \omega_{mn} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (2.49)$$

Борівська частота. Зокрема, матриця оператора швидкості матиме елементи

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_{mn} = i\omega_{mn} x_{mn}, \quad (2.50)$$

де x_{mn} – елементи матриці координати x . Співвідношення між швидкістю і координатою виходить таким же, як для осцилятора, що коливається з частотою ω_{mn} .

На закінчення цього параграфу вкажемо, без математичних подробиць, на особливо важливу роль, яку відіграють унітарні матриці в теорії зображень.

Припустимо, що потрібно зробити перетворення будь-якого оператора $\hat{G}$ від одного довільного представлення до іншого. Нехай в першому представленні оператор $\hat{G}$ зображується матрицею G' , елементи якої нумеруються власними значеннями $L = L_1, L_2, \dots, L_n, \dots, L_m, \dots$ оператора $\hat{L}$ ("L"-представлення). У другому представленні нехай той же оператор $\hat{G}$ зображується матрицею G'' , елементи якої нумеруються власними значеннями $M = M_1, M_2, \dots, M_\alpha, \dots, M_\beta, \dots$ оператора $\hat{M}$ ("M"-представлення). Для визначеності будемо вважати, що $\hat{L}$ і $\hat{M}$ мають дискретний спектр. Якщо оператор $\hat{G}$ дано спочатку в "x"-представленні $\left[\hat{G} = \hat{G} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x \right) \right]$ і власні функції операторів $\hat{L}$ і $\hat{M}$ суть $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_n(x), \dots, \psi_m(x), \dots$ і $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots, \varphi_\alpha(x), \dots, \varphi_\beta(x), \dots$ відповідно, то матричні елементи оператора $\hat{G}$ в "L"-представленні визначаються формулою

$$G_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{G} \psi_n(x) dx, \quad (2.51)$$

а в "M"-представленні

$$G_{\alpha\beta} = \int \psi_\alpha^*(x) \hat{G} \psi_\beta(x) dx. \quad (2.52)$$

Для того щоб знайти зв'язок між матрицею G' з елементами G_{mn} і матрицею G'' з елементами $G_{\alpha\beta}$, розкладемо власні функції оператора $\hat{M}$ за власними функціями оператора $\hat{L}$

Для того щоб знайти зв'язок між матрицею G' з елементами G_{mn} і матрицею G'' з елементами $G_{\alpha\beta}$, розкладемо власні функції оператора $\hat{M}$ за власними функціями оператора $\hat{L}$

$$\varphi_\beta(x) = \sum_n \psi_n(x) S_{n\beta}, \quad \varphi_\alpha^*(x) = \sum_m \psi_m^*(x) S_{m\alpha}^*, \quad (2.53)$$

причому

$$S_{n\beta} = \int \psi_n^*(x) \varphi_\beta(x) dx, \quad S_{m\alpha}^* = \int \psi_m(x) \varphi_\alpha^*(x) dx \quad (2.54)$$

Підстановка (2.53) в (2.52) з урахуванням (2.51) дає

$$G_{\alpha\beta} = \sum_m \sum_n S_{m\alpha}^* G_{mn} S_{n\beta} \quad (2.55)$$

Сукупність величин $S_{n\beta}$ можна розглядати як матрицю S , рядки якої нумеруються власними значеннями величини L , а стовпці – власними значеннями величини M . Поряд з матрицею S розглянемо ермітово спряжену матрицю (див. (2.21))

$$(S^+)_{\alpha m} = S_{m\alpha}^*, \quad (2.56)$$

так що рядки матриці S^+ нумеруються власними значеннями M , а стовпці – власними значеннями L . На підставі (2.56) формула (2.55) може бути записана у вигляді

$$G_{\alpha\beta} = \sum_m \sum_n (S^+)_{\alpha m} G_{mn} S_{n\beta}, \quad (2.57)$$

або, на підставі правила множення матриць (2.16'), в матричному вигляді

$$G'' = S^+ G' S. \quad (2.58)$$

Далі неважко показати, що матриця S задовольняє умові (2.24)

$$S^+ = S^{-1},$$

тобто є унітарною. Тому перетворення (2.58) називається унітарним.

З точки зору матричного обчислення, завдання про знаходження власних значень будь-якого оператора можна розглядати як задачу про приведення матриць, що зображують оператор, до діагонального вигляду. У термінах унітарних перетворень ця задача може бути сформульована так: знайти унітарне перетворення S , яке перетворило б матрицю оператора $\hat{G}$ до діагонального вигляду. Щоб знайти це перетворення, помножимо рівняння (2.58) зліва на S . Використовуючи те, що $SS^+ = I$, отримаємо

$$SG'' = G'S, \quad (2.59)$$

або в розкритому вигляді

$$\sum_{\alpha} S_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta} = \sum_n G_{mn} S_{n\beta} \quad (2.60)$$

Якщо матриця $G_{\alpha\beta}$ діагональна, то

$$S_{m\alpha} G_{\alpha\alpha} = \sum_n G_{mn} S_{n\alpha}. \quad (2.61)$$

Так як власні значення $G_{\alpha\alpha}$ нам невідомі, то слід опустити індекс α , і отримаємо

$$S_m G = \sum_n G_{mn} S_n, \quad (2.62)$$

що збігається з рівнянням (2.33), якщо покласти $\hat{G} = \hat{L}$, $S_n = c_n$.

§3. Матриці Паулі

В основі математичного апарату теорії спіна, яка розроблена Паулі, лежать матриці, які отримали його ім'я.

Гіпотеза спіна належить, як відомо, Уленбеку і Гаудсміту (1925) і пов'язана зі спробою пояснити мультиплетну структуру спектрів. Вона полягає в тому, що електрону, крім орбітального механічного і магнітного моментів, потрібно дописати ще й власний механічний і магнітний моменти (не пов'язані з рухом його центра ваги) і які мають назву спінові. Саме явище існування власного моменту названо спіном (to spin – обертати). Ця гіпотеза відразу дозволяє пояснити походження подвійного (дублетного) розщеплення термів одновалентних атомів, а потім і розвинути теорію аномального ефекту Зеемана. Про існування спіна свідчать досліди (не зрозумілі у свій час), перш за все досліди Штерна і Герлаха (1921), в яких спостерігалось розщеплення надвоє пучка атомів водню, свідомо що знаходяться в s-стані. В такому стані механічний, а разом з ним і магнітний орбітальний моменти дорівнюють нулю. Тим часом факт відхилення пучка атомів в магнітному полі показує, що атоми мають в s-стані магнітний момент. Розщеплення тільки на два пучка говорить про те, що проекція цього магнітного моменту може приймати тільки два значення. Вимірювання показали, що абсолютна величина цього моменту дорівнює магнетону Бора μ_B . Таким чином, в s-стані атома, що має лише один електрон, існує магнітний момент μ , проекції якого на напрям магнітного поля приймають тільки два значення $\pm\mu_B$.

Не менш показовим є і досвід Ейнштейна-де Гааза (1915), в якому вивчалася зв'язок між механічним і магнітним моментом ферромагнітного стрижня, вміщеного в магнітне поле і який піддавався перемагнічуванню. У

цьому досліді було виявлено аномальне гіромагнітне відношення, тобто $-\frac{e}{m}$ замість $-\frac{e}{2m}$ ($-e$ і m - заряд і маса електрона).

У своїй гіпотезі Уленбек і Гаудсмит припустили, що проекція власного механічного моменту електрона на будь-який напрямок вимірюється напівцілим числом постійних Планка і може приймати тільки два значення

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (3.1)$$

Відповідно до дослідних даних, вони припускають також, що у електрона є також власний магнітний момент μ , проекція якого μ_z на будь-який напрямок може приймати тільки два значення

$$\mu_z = \pm \mu_B = \pm \frac{e\hbar}{2m}. \quad (3.2)$$

З (3.1) і (3.2) випливає, що

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m} \vec{s}, \quad (3.3)$$

що спостерігалось в досвіді Ейнштейна-де Гааза.

Відповідно до загальних принципів квантової механіки власний механічний момент електрона (в подальшому будемо говорити просто спін електрона) повинен зображуватися лінійним самоспряженим оператором. Позначимо оператори проекцій спіну на координатні осі як $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$. Щоб визначити вид цих операторів, вимагатимемо, щоб вони підкорялися тим же правилам перестановки, що і оператори компонент орбітального моменту $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$, тобто

$$\left. \begin{aligned} \hat{s}_x \hat{s}_y - \hat{s}_y \hat{s}_x &= i\hbar \hat{s}_z, \\ \hat{s}_y \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_y &= i\hbar \hat{s}_x, \\ \hat{s}_z \hat{s}_x - \hat{s}_x \hat{s}_z &= i\hbar \hat{s}_y. \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

Проекція спіна на будь-який напрямок (по вихідній гіпотезі) може приймати два значення $\pm \frac{\hbar}{2}$. Тому оператори $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ повинні бути зображені дворядними матрицями. Оскільки дворядна матриця, будучи приведена до діагонального вигляду, містить лише два діагональних елемента і, отже, має тільки два власних значення. Вважаючи

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z, \quad (3.5)$$

ми можемо стверджувати, що оператори $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ (спінові матриці) мають бути дворядними матрицями у вигляді

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \sigma_y = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix}, \sigma_z = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix}, \quad (3.6)$$

які мають власне значення ± 1 . Підставляючи (3.5) в (3.4) і скоротивши на $\frac{\hbar^2}{4}$, отримаємо

$$\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z, \quad (3.7)$$

$$\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y = 2i\sigma_x, \quad (3.8)$$

$$\sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z = 2i\sigma_y. \quad (3.9)$$

Оскільки власні значення $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ дорівнюють ± 1 , то власні значення операторів $\sigma_x^2, \sigma_y^2, \sigma_z^2$ дорівнює $+1$. Тому у своєму власному уявленні ці крайні матриці повинні мати вигляд

$$\sigma_x^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \sigma_y^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \sigma_z^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad (3.10)$$

тобто вони є одиничними матрицями δ ,

$$\delta = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (3.11)$$

Одинична матриця буде одиничною у всякому представленні. Тому матриці $\sigma_x^2, \sigma_y^2, \sigma_z^2$ мають вигляд (3.10) у всякому представленні. Розглянемо тепер комбінацію

$$2i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 2i\sigma_x\sigma_y + 2i\sigma_y\sigma_x.$$

На основі (3.8) це можна переписати у виді

$$(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y)\sigma_y + \sigma_y(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y) = \sigma_y\sigma_z\sigma_y - \sigma_z\sigma_y^2 + \sigma_y^2\sigma_z - \sigma_y\sigma_z\sigma_y = \sigma_y^2\sigma_z - \sigma_z\sigma_y^2;$$

$$\text{але } \sigma_y^2 = \delta, \text{ тому } \sigma_y^2\sigma_z = \sigma_z\sigma_y^2.$$

Отже

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x, \quad (3.12)$$

тобто матриці σ_x, σ_y антикомутують.

Комбінуючи (3.12) з (3.7), (3.8) і (3.9) та застосувавши циклічну перестановку $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, знаходимо

$$\left. \begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z, \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z \sigma_x &= -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y. \end{aligned} \right\} \quad (3.13)$$

Знайдемо тепер явний вид матриць $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Нехай, наприклад, матриця σ_z приведена до діагонального вигляду. Оскільки її власні значення рівні ± 1 , то діагональний вид σ_z буде

$$\sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (3.14)$$

Можна показати, що в цьому ж уявленні інші дві матриці σ_x, σ_y матимуть вигляд

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}. \quad (3.15)$$

Для доказу утворюємо добутки $\sigma_z \sigma_x$ і $\sigma_x \sigma_z$. За правилом матричного множення маємо

$$\begin{aligned} \sigma_z \sigma_x &= \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{vmatrix}, \\ \sigma_x \sigma_z &= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

На підставі (3.13) маємо

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & a_{22} \end{vmatrix},$$

або

$$a_{11} = -a_{11}, a_{12} = a_{12}, -a_{21} = -a_{21}, -a_{22} = a_{22},$$

тобто

$$a_{11} = 0, a_{22} = 0.$$

Тому матриця σ_x має вигляд

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{vmatrix}. \quad (3.16)$$

Утворимо тепер σ_x^2 :

$$\sigma_x^2 = \begin{vmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{12} & a_{21} & 0 \\ 0 & a_{12} & a_{21} \end{vmatrix}.$$

Порівнюючи з (3.10), отримуємо, що $a_{12}a_{21} = 1$. Матриця повинна бути самоспряженою, тобто $a_{12} = a_{21}^*$ отже, $|a_{12}|^2 = 1$.

Звідси отримуємо

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{vmatrix}, \quad (3.17)$$

де α - дійсне число.

Подібним же чином знаходимо, що

$$\sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{vmatrix}.$$

Перемножуючи тепер σ_x на σ_y , а потім σ_y на σ_x і користуючись (3.13), отримуємо

$$\begin{vmatrix} e^{i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & e^{-i(\alpha-\beta)} \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} e^{-i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & e^{i(\alpha-\beta)} \end{vmatrix},$$

звідси $e^{i(\alpha-\beta)} = -e^{-i(\alpha-\beta)}$,

тобто $\alpha - \beta = \frac{\pi}{2}$. Таким чином, всі співвідношення задоволені при довільному значенні α . Тому без всяких обмежень ми можемо взяти $\alpha = 0$, $\beta = -\frac{\pi}{2}$. Підставляючи ці значення в (3.17) і в (3.18), отримуємо (3.15).

Матриці (3.15) і (3.14) називаються матрицями Паулі. Згідно (3.5) з (3.14) і (3.15) отримуємо матриці операторів $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ в уявленні, в якому матриця s_z діагональна ("s_z"-представлення):

$$\hat{s}_x = \begin{vmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{vmatrix}, \hat{s}_y = \begin{vmatrix} 0 & -i\frac{\hbar}{2} \\ i\frac{\hbar}{2} & 0 \end{vmatrix}, \hat{s}_z = \begin{vmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{vmatrix}. \quad (3.19)$$

Зауважимо, що значки 1 і 2, які нумерують матричні елементи матриць σ і s , набувають тепер (оскільки вибрано представлення) певне значення: значок 1 відноситься до першого власного значення $s_z = +\frac{\hbar}{2}$, а 2 – до другого $s_z = -\frac{\hbar}{2}$.

Утворимо тепер оператор квадрата спіну електрона. З (3.19) маємо

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \delta. \quad (3.20)$$

Вводячи квантові числа m_s і l_s , що визначають значення проекції спіна на будь-який напрямок OZ і його квадрата відповідно, можна написати формули для квантування спіну в повній аналогії з відомими формулами для орбітального моменту

$$s^2 = \hbar^2 l_s(l_s + 1), l_s = \frac{1}{2} \quad (3.21)$$

$$s_z = \hbar m_s, m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (3.22)$$

Облік спіну повинен, природно, відображатися і в написанні хвильової функції електрона, тобто цю функцію слід вважати функцією чотирьох змінних: три відносяться до центру тяжіння електрона, а четверта – до спіну (s_z). Наприклад, в координатному представленні для електрона слід писати

$$\psi = \psi(x, y, z, s_z, t). \quad (3.23)$$

Оскільки спінова змінна має тільки два значення $\left(\pm \frac{\hbar}{2}\right)$, то можна сказати, що замість однієї функції ми отримуємо дві:

$$\psi_1 = \psi\left(x, y, z, +\frac{\hbar}{2}, t\right), \quad (3.24)$$

$$\psi_2 = \psi\left(x, y, z, -\frac{\hbar}{2}, t\right). \quad (3.25)$$

Ці функції часто пишуть у вигляді матриці з одним стовпцем

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1 & 0 \\ \psi_2 & 0 \end{vmatrix} \quad (3.26)$$

(Матриця (3.26) називається спінором і записується зазвичай як $\begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}$).

Спряжену функцію записують у вигляді матриці з одним рядком і позначають знаком ермітового спряження

$$\Psi^+ = \begin{vmatrix} \psi_1^* & 0 \\ \psi_2^* & 0 \end{vmatrix}. \quad (3.27)$$

Хвильові функції ψ_1 і ψ_2 будуть різні тільки в тому випадку, якщо існує реальний зв'язок між спіном і рухом центру ваги (спін-орбітальний зв'язок). Такий зв'язок існує і являє собою взаємодію спінового магнітного моменту з магнітним полем струмів, що створені рухом центра ваги електрона. Ця взаємодія обумовлює мультиплетну структуру спектрів. Тому,

якщо ми ігноруємо мультиплетну структуру спектрів, то взаємодією між спіном і орбітою взагалі можна знехтувати. У такому наближенні

$$\psi_1(x, y, z, t) = \psi_2(x, y, z, t) = \psi(x, y, z, t) \quad (3.28)$$

Однак і в цьому випадку, щоб відзначити, що мова йде про частинку, яка має спін, пишуть функцію (3.23) у вигляді, який відповідний поділу змінних

$$\psi(x, y, z, s_z, t) = \psi(x, y, z, t) S_\alpha(s_z), \quad (3.29)$$

де $S_\alpha(s_z)$ – спінова функція. По суті це простий значок, який вказує стан спіну частинки.

Сенс цього «значка» (спінової функції) полягає в наступному: індекс α приймає два значення, які зазвичай вважають рівними $+\frac{1}{2}$ і $-\frac{1}{2}$ (замість 1 та 2). Перше значення означає, що проекція спіну на деякий обраний напрям OZ дорівнює $+\frac{\hbar}{2}$, друге значення відноситься до проекції спіна, яка дорівнює $-\frac{\hbar}{2}$. «Аргумент» s_z «функції» S розглядають як незалежну змінну, спроможну приймати два значення $\pm\frac{\hbar}{2}$. Тоді

$$S_{+\frac{1}{2}}\left(\frac{\hbar}{2}\right) = 1, S_{+\frac{1}{2}}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 0. \quad (3.30)$$

Подібним же чином

$$S_{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\hbar}{2}\right) = 0, S_{-\frac{1}{2}}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 1. \quad (3.31)$$

Запис же у вигляді (3.23) і, як окремий випадок, під час відсутності спін-орбітальної взаємодії, у вигляді (3.29) дозволяє розглядати спін s_z як динамічну змінну, подібну будь-який іншій механічній величині.

Введенні «хвильові» функції спіну $S_\alpha(s_z)$ мають властивість ортонормування. Справді, візьмемо добуток

$$S_\alpha^*(s_z) S_\beta(s_z),$$

де S^* означає, як завжди функцію, спряжену з S , а $\alpha, \beta = \pm\frac{1}{2}$. Підсумуємо цей добуток по всіх можливих значеннях спінової змінної s_z (таких значень тільки два: $\pm\frac{\hbar}{2}$). Тоді безпосередньо з (3.30) і (3.31) (маючи на увазі, що $S^* =$

S) випливає, що

$$\sum_{s_z} S_{\alpha}^{*}(s_z) S_{\beta}(s_z) = \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.32)$$

Функція $S_{\alpha}(s_z)$ може бути записана в матричній формі (3.26)

$$S_{+\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, S_{-\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad (3.33)$$

$$S_{+\frac{1}{2}}^{+} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, S_{-\frac{1}{2}}^{+} = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (3.34)$$

§4. Гармонічний осцилятор

Завдання на відшукування власних значень і власних функцій оператора енергії для лінійного квантового гармонічного осцилятора є традиційною для всіх, без винятку, курсів квантової механіки. Однак, зважаючи на особливу важливість цього завдання для всієї квантової фізики взагалі, ми докладно опишемо її рішення.

Ідеалізований гармонічний осцилятор – це точкова маса, прикріплена до ідеальної пружини, за умови повної відсутності тертя. Сила, що повертає цієї пружинки вважається строго пропорційною її подовженню.

У квантовій теорії багатьох фізичних явищ ми фактично маємо справу з квантовою теорією простого одновимірного гармонічного осцилятора. Як приклади можна назвати, зокрема, квантовий розгляд мод електромагнітного випромінювання, коливань кристалічної решітки твердого тіла і навіть електричних коливань радіотехнічного коливального контуру.

Математична теорія цього завдання елегантна, і її корисно добре засвоїти, бо це дає можливість опанувати такими важливими розділами науки, як квантова оптика, квантова теорія флуктуацій, шумів і теорія когерентності.

Перейдемо тепер безпосередньо до вирішення завдання про гармонічний осцилятор.

Стаціонарне рівняння Шредінгера для одновимірного гармонічного

осцилятора з силою, що повертається kx має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 U}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} U = EU. \quad (4.1)$$

Використовуючи заміну

$$\xi = \alpha x, \alpha^4 = \frac{mk}{\hbar^2} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2, \omega^2 = \frac{k}{m}, \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

рівняння (4.1) легко привести до вигляду

$$\frac{d^2 U}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)U = 0 \quad (4.2)$$

При великих $\xi^2 \gg \lambda$ функція U веде себе як $\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$, так що природно спробувати шукати точне рішення у вигляді

$$U(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (4.3)$$

де $H(\xi)$ – деяка функція ξ .

Підставляючи (4.3) в (4.2), приходимо до рівняння

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0. \quad (4.4)$$

Припустимо тепер, що функцію H можна представити у вигляді наступного ряду:

$$H(\xi) = \xi^s (a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \dots), \quad (4.5)$$

де $a_0 \xi^s$ – перший ненульовий член розкладання. Підставляючи (4.5) в (4.4) і прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових ступенях ξ , одержуємо рівняння

$$s(s-1)a_0 = 0,$$

$$(s+1)sa_1 = 0,$$

$$(s+2)(s+1)a_2 - (2s+1-\lambda)a_0 = 0,$$

$$\dots \dots \dots$$

$$\dots \dots \dots$$

$$\dots \dots \dots$$

$$(s+v+2)(s+v+1)a_{v+2} - (2s+2v+1-\lambda)a_v = 0. \quad (4.6)$$

Оскільки $a_0 \neq 0$, з першого рівняння в (4.6) випливає, що або $s = 0$, або $s = 1$. З другого рівняння в (4.6) робимо висновок, що $s = 0$, або $a_1 = 0$, або

$s = a_1 = 0$. Останнє рівняння в (4.6) показує, як коефіцієнт a_{v+2} можна обчислити за попереднім коефіцієнтом a_v . Розкладання (4.5), таким чином, природно розпадається на суму двох розкладів: 1) розкладання, що містить a_v з парними цілочисловими значеннями індексу v (воно починається з a_0); 2) розкладання, що містить a_v з непарними значеннями індексу v (воно починається з a_1).

Розглянемо спочатку випадок $s = 0$. Так як $a_0 \neq 0$, є лише єдина можливість обірвати нескінченний ряд з коефіцієнтів a_v з парним v . Треба вимагати, щоб величина λ задовольняла співвідношенню

$$\lambda = 2v + 1 \quad (4.7)$$

при деякому v . Оскільки v додатне число, згідно (4.7), λ буде приймати значення

$$\lambda = 2v + 1 = 1, 5, 9, \dots \quad (4.8)$$

Як видно з (4.6), при такому виборі λ ми не можемо обірвати нескінченний ряд коефіцієнтів a_v з непарними v . Тому єдина можливість залишити в розкладанні $H(\xi)$ кінцеве число членів – це вимагати, щоб $a_1 = 0$. Тоді ми взагалі видалимо з ряду a_v з непарними v .

Аналогічно можна розглядати випадок $s = 1$ і зробити висновок, що можна обірвати ряд з a_v з парними v і взагалі відкинути ряд з a_v з непарними v , оскільки $a_1 = 0$. Тоді величина λ повинна приймати значення

$$\lambda = 2v + 3 = 3, 7, 11, \dots \quad (4.9)$$

Добутий поліном $H_n(\xi)$ має непарний ступінь (оскільки поліном парного ступеня множиться на ξ).

З огляду на (4.7), (4.8) і (4.9), приходимо до висновку, що можливі значення λ даються формулою

$$\lambda = 2n + 1, n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

З використанням співвідношення $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ остання формула призводить до наступних дискретних значень власних чисел енергії гармонічного осцилятора

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.10)$$

Згідно (4.10), квантовий осцилятор навіть в стані з $n = 0$ має відмінну від нуля енергією $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Найменша можлива енергія класичного гармонічного осцилятора, звичайно, дорівнює нулю. Ця велика різниця квантового та класичного осциляторів є наслідком співвідношення невизначеностей.

Справді, якщо класичний осцилятор має нульову енергію, то його імпульс p і координата x одночасно дорівнюють нулю. Але цього не може бути в квантовій механіці, тому що, згідно із співвідношенням невизначеностей, $\Delta p \Delta x \geq \hbar$. Якщо невизначеності Δp і Δx розподілені між імпульсом p і координатою x таким чином, що повна енергія E_n мінімальна і співвідношення невизначеностей задовольняється, то ми отримуємо саме значення $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Доведемо це. Співвідношення невизначеностей в найбільш загальному і строгому вигляді записується так

$$\overline{(\Delta p)^2} \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Середні значення $\bar{p}$ і $\bar{x}$ в стані з певним значенням енергії, як неважко показати, дорівнюють 0 ($\bar{x} = 0, \bar{p} = 0$). Тому для осцилятора співвідношення невизначеностей можна записати у вигляді

$$\overline{p^2} \overline{x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (4.11)$$

З іншого боку, середня енергія осцилятора дорівнює

$$\bar{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{k\overline{x^2}}{2}. \quad (4.12)$$

Об'єднуючи (4.11) і (4.12) і враховуючи, що $k = m\omega^2$, отримуємо

$$\bar{E} \geq \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8\overline{p^2}}. \quad (4.13)$$

Мінімізуючи останній вираз по $\overline{p^2}$, ми з умови

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial (\overline{p^2})} = 0$$

Знаходимо

$$\min \bar{E} \geq \frac{\hbar \omega}{2},$$

тобто нульова енергія є найменшою енергією, сумісною з співвідношенням невизначеностей.

Поліноми Ерміта. Ми бачимо, що рішеннями звичайного диференціального рівняння (4.4), які відповідають значенням $\lambda = 2n + 1$, є поліноми ступеня n . Поліноми парні, якщо n парне, і непарні, якщо n непарне. Вважаючи $\lambda = 2n + 1$ в (4.4), отримуємо диференціальне рівняння для поліномів $H_n(\xi)$, які називаються поліномами Ерміта:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0. \quad (4.15)$$

Ці поліноми легко побудувати, розкладаючи функцію $e^{-s^2+2s\xi}$ в ряд за ступенями s :

$$G(\xi, s) = e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} = e^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n. \quad (4.16)$$

Функцію $G(\xi, s)$ називають твірною функцією.

Покажемо, що поліноми $H_n(\xi)$, побудовані за допомогою розкладання (4.16), задовольняють диференціальному рівнянню (4.15). Для цього виведемо два важливих рекурентних співвідношення.

Диференціюючи ряд (4.16) по ξ , прийдемо до формули

$$2se^{-s^2+2s\xi} = 2s \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(\xi)}{n!} s^n,$$

в якій штрихом позначена похідна полінома Ерміта по його аргументу. Прирівнюючи коефіцієнти при однакових ступенях s , прийдемо до першого рекурентного співвідношення

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi). \quad (4.17)$$

Друге рекурентне співвідношення отримаємо, диференціюючи ряд (4.16) по s :

$$e^{-s^2+2s\xi} (2\xi - 2s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)ns^{n-1}}{n!} \quad (4.18)$$

Використовуючи формулу (4.16) для розкладання експоненти, що стоїть в лівій частині (4.18), отримуємо

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(-2 \frac{H_n(\xi)}{n!} s^{n+1} + 2 \frac{H_n(\xi)}{n!} \xi s^n \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi) n s^{n-1}}{n!}.$$

Звідси безпосередньо випливає шукане друге рекурентне співвідношення

$$\xi H_n(\xi) = \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) + n H_{n-1}(\xi). \quad (4.19)$$

З першого співвідношення (4.17) отримуємо

$$H_n'' = 2n H_{n-1}', \quad (4.20)$$

тому друге співвідношення (4.19) можна представити у вигляді

$$2n H_{n-1}' = \frac{d}{d\xi} (2\xi H_n) - H_{n+1}' = 2\xi H_n' + 2H_n - H_{n+1}'.$$

Тому співвідношення можна перетворити, використовуючи (4.17) і (4.20), до виду звичайного диференціального рівняння

$$H_n'' - 2\xi H_n'(\xi) + 2n H_n(\xi) = 0, \quad (4.21)$$

яке в точності збігається з диференціальним рівнянням (4.15).

Таким чином, в якості основних формул, що визначають поліноми Ерміта $H_n(\xi)$, можна використовувати або рівняння (4.15), або формулу (4.16), або рекурентні співвідношення (4.17) і (4.19).

З формули (4.16) відразу отримуємо ще одну формулу, яка визначає поліноми Ерміта:

$$H_n(\xi) = \frac{\partial^n}{\partial s^n} (e^{\xi^2 - (s-\xi)^2}) \Big|_{s=0} = e^{\xi^2} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-\xi)^2} \Big|_{s=0} = e^{\xi^2} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-\xi^2}. \quad (4.22)$$

Використовуючи (4.22) для обчислення перших трьох поліномів Ерміта, отримаємо для них прості вирази:

$$H_0(\xi) = 1, H_1(\xi) = 2\xi, H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2. \quad (4.23)$$

Як видно, поліноми Ерміта визначені таким чином, що коефіцієнт при найбільшому ступені ξ в поліномі $H_n(\xi)$ дорівнює 2^n .

Згідно (4.3), власні функції гармонічного осцилятора мають вигляд

$$U_n(x) = N_n e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x). \quad (4.24)$$

Нормувальний множник, який входить сюди, слід вибрати з умови

$$\int_{-\infty}^{\infty} U_n^* U_n dx = 1. \quad (4.25)$$

Обчислення інтегралів, що містять функції (4.24), вимагає спеціальних методів, на яких ми тут зупинятися не будемо.

§5. Оператори знищення та народження

Розглянемо два нових оператора $\hat{a}$ і $\hat{a}^+$, що визначаються формулами

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{2}\hbar\alpha} \hat{p}_x = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \frac{\partial}{\partial x}, \\ \hat{a}^+ &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{2}\hbar\alpha} \hat{p}_x = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \hat{x} - \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \frac{\partial}{\partial x}, \end{aligned} \quad (5.1)$$

в яких $\alpha^4 = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2$.

Переходячи в цих формулах від змінної x до змінної $\xi = \alpha x$, отримуємо прості співвідношення:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right), \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right). \quad (5.2)$$

Обчислимо тепер, як діє оператор $\hat{a}$ на власну функцію $U_n(\alpha x)$ гармонічного осцилятора. Очевидно, в силу (5.2),

$$\begin{aligned} \hat{a}U_n(\alpha x) &= \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) N_n H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \\ &= \frac{N_n}{\sqrt{2}} (\xi H_n - \xi H_n + H'_n) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \frac{N_n}{\sqrt{2}} H'_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Обчислення нормувального множника з (4.25) (не наведене нами) дає

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} n! 2^n} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.4)$$

Підставляючи (5.4), а також (4.17), в праву частину (5.3), знаходимо

$$\frac{N_n}{\sqrt{2}} H'_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = n^{\frac{1}{2}} N_{n-1} H_{n-1}(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

так що остаточно маємо наступну просту формулу:

$$\hat{a}U_n = n^{\frac{1}{2}} U_{n-1}.$$

Аналогічні міркування дають

$$\hat{a}^+ U_n = (n + 1)^{\frac{1}{2}} U_{n+1}. \quad (5.6)$$

Формули (5.5) та (5.6) вказують на наступне. У результаті дії оператора $\hat{a}$ на власну функцію U_n отримуємо сусідню з нею по енергії власну функцію U_{n-1} . Енергія, що відповідає їй, на один квант $\hbar\omega$ менше енергії, що відповідає функції U_n . Із зазначеної причини оператор називають (осциляторним) оператором знищення (в квантовій електродинаміці його називають іноді оператором поглинання). Оператор $\hat{a}^+$ називають оператором народження (випромінювання), тому що він перетворює функцію U_n в функцію U_{n+1} , що відповідає енергії, яка на один квант $\hbar\omega$ більше енергії, що відповідає функції U_n .

З (5.1) безпосередньо випливає, що оператори $\hat{a}$ і $\hat{a}^+$ не є ермітовими. Дійсно, вони представляються як суми з комплексними коефіцієнтами двох ермітових операторів $\hat{x}$ і $\hat{p}_x$. Тому, зокрема, оператори $\hat{a}$ і $\hat{a}^+$ не можна розглядати як квантові оператори будь-яких фізичних величин.

Обчислимо комутатор операторів $\hat{a}$ та $\hat{a}^+$. Використовуючи формули, що їх визначають (5.1), маємо

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \left[\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}} \hat{x} + \frac{i\hat{p}_x}{\sqrt{2}\hbar\alpha} \right), \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}} \hat{x} - \frac{i\hat{p}_x}{\sqrt{2}\hbar\alpha} \right) \right] = -\frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}_x] + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}_x, \hat{x}]. \quad (5.7)$$

Згідно комутаційним співвідношенням Гейзенберга $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, права частина (5.7) дорівнює одиниці:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (5.8)$$

Обертаючи формули (5.1), можна виразити оператори $\hat{x}$ і $\hat{p}_x$ через оператори $\hat{a}$ і $\hat{a}^+$. Приходимо до простих співвідношень:

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} (\hat{a}^+ + \hat{a}), \quad \hat{p}_x = \frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a}). \quad (5.9)$$

Підставляючи (5.9) в формулу для гамільтоніана

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} k \hat{x}^2$$

і використовуючи позначення $\alpha^4 = \frac{km}{\hbar^2}$, $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, отримаємо формулу

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}),$$

яку з урахуванням перестановочного співвідношення (5.8) можна представити у вигляді

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (5.10)$$

Таким чином, ми отримаємо найзручніший вираз для гамільтоніана квантового гармонічного осцилятора, яким часто користуються в квантовій електродинаміці, квантовій оптиці і квантовій теорії когерентних станів.

Оператор $\hat{a}^+ \hat{a}$ комутує з оператором $\hat{H}$. Його власні числа даються цілими числами n . Щоб в цьому переконатися, достатньо звернутися до співвідношень (5.5) і (5.6). тоді отримаємо

$$\hat{a}^+ \hat{a} U_n = \hat{a}^+ \sqrt{n} U_{n-1} = n U_n.$$

§6. Теорія збурень

Розділ I цього посібника ми завершимо розглядом теорії збурень, одного з найбільш важливих наближених методів квантової механіки.

Особливий інтерес квантова механіка проявляє до вирішення стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_0 U_m = E_m U_m,$$

тобто до задачі на знаходження власних значень і власних функцій оператора Гамільтона $\hat{H}_0$. Одну з таких завдань ми розглянули в §4.

Зараз ми встановимо, який вплив чинять малі збурення, що додаються до нульового гамільтоніана $\hat{H}_0$ на його власні значення E_m і власні функції U_m .

З такими збуреннями доводиться часто зустрічатися на практиці, з'ясовуючи, наприклад, як діють на ту чи іншу атомну систему зовнішні електромагнітні або постійні магнітні і електричні поля або зіткнення її з іншими атомами і молекулами, якщо тільки, звичайно, зазначені фізичні ефекти не включені вже в нульовий гамільтоніан $\hat{H}_0$ розглянутої атомної системи.

Теорія збурень, яку ми коротко викладемо нижче, використовується саме тому, що рівняння Шредінгера рідко вдається вирішити точно.

Почнемо зі стаціонарної теорії збурень.

Розглянемо таку задачу. Нехай дано нульовий гамільтоніан $\hat{H}_0$ і відомі всі його власні функції U_m і власні значення E_m , тобто нехай відомі всі рішення стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_0 U_m = E_m U_m. \quad (6.1)$$

З'ясуємо, якими будуть нові власні функції і власні значення, якщо тепер ми додамо до гамільтоніана $\hat{H}_0$ деяке мале збурення $\hat{H}'$, тобто перейдемо від гамільтоніана $\hat{H}_0$ до гамільтоніану $\hat{H}_0 + \hat{H}'$.

Один з методів вирішення зазначеного завдання полягає в діагоналізації матриці оператора $\hat{H}_0 + \hat{H}'$, про що ми згадували вище.

Разом з тим, коли $\hat{H}' \ll \hat{H}_0$ можна використовувати інший метод – метод теорії збурень, який дозволяє обчислювати поправки до власних функцій U_m і власних числах E_m до будь-якого необхідного порядку.

Поправки першого порядку. Уявімо повний гамільтоніан у вигляді $\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$, де λ – деякий параметр, який приймає значення з інтервалу $0 \leq \lambda \leq 1$. Він ніби «включає» (при $\lambda = 1$) або «вимикає» (при $\lambda = 0$) мале збурення. Будемо шукати власні числа W і власні функції ψ гамільтоніана $\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$, використовуючи основне рівняння.

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') \psi = W \psi. \quad (6.2)$$

Уявімо, величини, що цікавлять нас, як розкладання за цілими позитивними ступенями параметра λ :

$$\psi = \psi_0 + \lambda \psi_1 + \lambda^2 \psi_2 + \dots, W = W_0 + \lambda W_1 + \lambda^2 W_2 + \dots \quad (6.3)$$

Підставляючи розкладання (6.3) у вихідне рівняння (6.2), отримуємо

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}')(\psi_0 + \lambda \psi_1 + \lambda^2 \psi_2 + \dots) = (W_0 + \lambda W_1 + \lambda^2 W_2 + \dots)(\psi_0 + \lambda \psi_1 + \lambda^2 \psi_2 + \dots).$$

Прирівнюючи коефіцієнти при λ^0 , λ^1 і λ^2 в загальних частинах останньої рівності, отримуємо власне рівняння

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 \psi_0 &= W_0 \psi_0 \\
\hat{H}_0 \psi_1 + \hat{H}' \psi_0 &= W_0 \psi_1 + W_1 \psi_0 \\
\hat{H}_0 \psi_2 + \hat{H}' \psi_1 &= W_0 \psi_2 + W_1 \psi_1 + W_2 \psi_0 .
\end{aligned} \tag{6.4}$$

Перше рівняння (6.4) ідентичне з рівнянням (6.1), тому в нульовому наближенні маємо наступне рішення:

$$\psi_0 = U_m, W_0 = E_m, \tag{6.5}$$

де U_m и E_m – деяка власна функція і відповідне їй власне значення нульового гамільтоніана $\hat{H}_0$, тобто гамільтоніана, в який перетворюється повний гамільтоніан за відсутності збурення.

Займемося другим рівнянням (6.4). Розкладемо функцію ψ_1 в ряд по функціям U_n :

$$\psi_1 = \sum_n a_n^{(1)} U_n \tag{6.6}$$

і підставимо цей ряд в друге рівняння (6.4). Будемо мати

$$\sum_n a_n^{(1)} E_n U_n + \hat{H}' U_m = E_m \sum_n a_n^{(1)} U_n + W_1 U_m,$$

помножуючи яке на U_k^* і інтегруючи, а також використовуючи умову ортонормування $\langle U_n | U_k \rangle = \delta_{kn}$, отримаємо рівняння

$$E_k a_k^{(1)} + H'_{km} = E_m a_k^{(1)} + W_1 \delta_{km}, \tag{6.7}$$

з якого при $k \neq m$ безпосередньо випливає, що

$$a_k^{(1)} = \frac{H'_{km}}{E_m - E_k}, \tag{6.8}$$

а при $k = m$

$$W_1 = H'_{mm}. \tag{6.9}$$

Таким чином, формула (6.9) дозволяє визначити величину W_1 – поправку першого порядку до енергії E_m . Це надзвичайно важливий результат квантово-механічної теорії збурень.

Залишається обчислити коефіцієнти $a_m^{(1)}$. Їх ми знайдемо з умови, що виправлена хвильова функція першого порядку $\psi = U_m + \lambda \psi_1$ повинна бути нормована на одиницю.

$$\int \left(U_m + \lambda \sum_n a_n^{(1)} U_n \right)^* \left(U_m + \lambda \sum_s a_s^{(1)} U_s \right) d^3 \vec{r} = 1 + \lambda a_m^{(1)} + \lambda a_m^{*(1)} +$$

$$\lambda^2 \sum_n a_n^{(1)} a_n^{*(1)} = 1. \quad (6.10)$$

Нехтуючи в останній формулі членами другого порядку, отримуємо, що $a_m^{(1)} = 0$.

Таким чином, власні функції і власні числа з урахуванням поправки першого порядку даються формулами:

$$\psi = U_m + \sum_{k \neq m} \frac{H'_{km}}{E_m - E_k} U_k, \quad (6.11)$$

$$W = E_m + H'_{mm}. \quad (6.12)$$

Поправки другого порядку. Тепер знайдемо вирази для поправок другого порядку W_2 і ψ_2 . Поправку другого порядку ψ_2 до хвильової функції представимо у вигляді ряду:

$$\psi_2 = \sum_n a_n^{(2)} U_n$$

і підставляємо цей ряд в третю формулу (6.1)

$$\sum_n a_n^{(2)} E_n U_n + \hat{H}' \sum_n a_n^{(1)} U_n = \sum_n a_n^{(2)} E_m U_n + W_1 \psi_1 + W_2 U_m.$$

Підставляючи в останню рівність також і розкладання (6.6) для функції ψ_1 , помножаючи його на U_k^* і інтегруючи, прийдемо до наступного рівняння:

$$a_k^{(2)} E_k + \sum_n a_n^{(1)} H'_{kn} = a_k^{(2)} E_m + W_1 a_k^{(1)} + W_2 \delta_{mk}. \quad (6.13)$$

Вважаючи в цьому рівнянні $k = m$, отримаємо

$$W_2 = \sum_n a_n^{(1)} H'_{mn} - W_1 a_m^{(1)} = \sum_{n \neq m} a_n^{(1)} H'_{mn} + a_m^{(1)} H'_{mm} - W_1 a_m^{(1)}.$$

Підставляючи сюди явні вирази (6.8) для $a_n^{(1)}$ і (6.9) для W_1 , бачимо, що останні два доданки в правій частині взаємно знищуються. В результаті приходимо до формули

$$W_2 = \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{mn}|^2}{E_m - E_n} \quad (6.14)$$

для поправки другого порядку до енергії.

Розглянемо тепер рівняння (6.13) при $k \neq m$. Використовуючи формули (6.8) і (6.9), а також враховуючи, що $a_m^{(1)} = 0$, знаходимо

$$a_k^{(2)} = \sum_n \frac{H'_{kn} H'_{nm}}{(E_m - E_n)(E_m - E_k)} - \frac{H'_{mm} H'_{km}}{(E_m - E_k)^2}, \quad k \neq m, n \neq m.$$

Щоб знайти величину $a_m^{(2)}$, потрібно знову розглянути умову

нормування (6.10). З точністю до поправок другого порядку цю умову можна записати у вигляді

$$\int \left(U_m + \lambda \sum_n a_n^{(1)} U_n + \lambda^2 \sum_n a_n^{(2)} U_n \right)^* \left(U_m + \lambda \sum_s a_s^{(1)} U_s + \lambda^2 \sum_s a_s^{(2)} U_s \right) d^3\vec{r} = 1.$$

Використовуючи також $a_m^{(1)} = 0$, отримаємо

$$a_m^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_n \left| a_n^{(1)} \right|^2 = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{mn}|^2}{(E_m - E_n)^2}. \quad (6.15)$$

Таким чином, вважаючи $\lambda = 1$, одержуємо наступні вирази для власних функцій і енергій з урахуванням поправок другого порядку:

$$\begin{aligned} \psi = U_m + \sum_{k \neq m} \frac{H'_{km}}{E_m - E_k} U_k + \\ \sum_{k \neq m} \left[\left(\sum_{n \neq m} \frac{H'_{kn} H'_{nm}}{(E_m - E_n)(E_m - E_k)} - \frac{H'_{mm} H'_{km}}{(E_m - E_k)^2} \right) U_k - \frac{|H'_{mn}|^2}{2(E_m - E_k)^2} U_m \right], \end{aligned} \quad (6.16)$$

$$W = E_m + H'_{mm} + \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{mn}|^2}{(E_m - E_n)}. \quad (6.17)$$

Звернемо увагу, що згідно з (6.14), поправка другого порядку до енергії, завжди прагне збільшити енергетичні різниці $|E_m - E_n|$. У квантовій механіці про це говорять так: «Енергетичні рівні прагнуть розштовхати один одного».

Тимчасова теорія збурень. Ця теорія використовується в якості основного методу при вивченні викликаних збуреннями квантових переходів. Із загальної теорії рівняння Шредінгера відомо, що для системи з незалежним від часу гамільтоніаном, загальне рішення повного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_0 \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (6.18)$$

можна представити розкладом

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n U_n(\vec{r}) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (6.19)$$

в якому коефіцієнти a_n довільні і U_n – власні функції гамільтоніана (задовольняють умові $\hat{H}_0 U_n = E_n U_n$).

Якщо система в деякий початковий момент часу, скажімо в момент

часу t , володіла енергією E_m , то слід вважати, що

$$a_m = 1, a_n = 0 \text{ при } n \neq m.$$

Таким чином, система буде володіти тією ж енергією E_m і в усі наступні моменти часу.

Припустимо тепер, що систему якимось чином збуримо, і її гамільтоніан змінився. Нехай замість нульового гамільтоніана $\hat{H}_0$ ми тепер маємо гамільтоніан

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t). \quad (6.21)$$

Залежну від часу хвильову функцію $\psi(t)$ потрібно шукати тепер як рішення наступного повного рівняння Шредінгера:

$$[\hat{H}_0 + \hat{H}'(t)]\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (6.22)$$

Використовуючи повноту функцій U , хвильову функцію $\psi(\vec{r}, t)$, що розглядається в кожний конкретний момент часу t , можна розкласти по функціям U_n :

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n(t) U_n(\vec{r}) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}. \quad (6.23)$$

Оскільки тепер новий гамільтоніан явно залежить від часу, коефіцієнти розкладання $a_n(t)$ в (6.23) на відміну від коефіцієнтів a_n в (6.19) є функціями часу t .

Припустимо, що при вимірюванні незбуреної енергії в певний момент часу t (скажімо в момент $t = 0$), ми отримали значення E_m . Тоді слід припустити, що в момент часу $t = 0$

$$a_m(0) = 1, a_n(0) = 0 \text{ при } n \neq m. \quad (6.24)$$

Оскільки коефіцієнти $a_n(t)$ змінюється з часом, наступний вимір енергії, виробленої, наприклад, в момент часу t , може дати будь-яке її значення E_k . Імовірність такої події дорівнює $|a_k(t)|^2$.

Таким чином, вирішуючи повне рівняння Шредінгера, ми можемо дізнатися, як в результаті дії обурення $\hat{H}'(t)$ змінюється з часом ймовірність знайти систему в різних власних станах U_n оператора $\hat{H}_0$.

Отже, щоб описати часову еволюцію системи, потрібно знайти

коефіцієнти $a_n(t)$.

Для цього підставимо розкладання (6.23) в (6.22). Отримаємо співвідношення

$$\sum_n U_n \left[a_n \left(-\frac{iE_n}{\hbar} \right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \right] = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n (\hat{H}_0 + \hat{H}') U_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}.$$

Помноживши його на U_k^* і інтегруючи, а також використовуючи умову ортонормування, приходимо до виразу

$$\dot{a}_k = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n H'_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t}, \quad (6.25)$$

де «циклічна частота» переходу $n \rightarrow k$ визначається співвідношенням

$$\omega_{kn} \equiv \frac{E_k - E_n}{\hbar}.$$

До сих пір не було зроблено ніяких наближень. Рішення системи (6.25) математично повністю еквівалентно розв'язку вихідного повного рівняння Шредінгера.

Також, як і раніше введемо тепер параметр λ , «що включає» і «вимикає» $\hat{H}'$. Повний гамільтоніан буде тоді дорівнює

$$\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'(t).$$

Коефіцієнти $a_n(t)$ можна представити розкладаннями

$$a_n = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \dots,$$

підставляючи які в (6.25), прийдемо до рівняння

$$\dot{a}_k^{(0)} + \lambda \dot{a}_k^{(1)} + \lambda^2 \dot{a}_k^{(2)} + \dots = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \left(a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \dots \right) \lambda H'_{kn} e^{i\omega_{kn}t}.$$

Прирівнюючи коефіцієнти при однакових ступенях λ в лівій і правій частинах рівності, отримаємо рівняння

$$\dot{a}_k^{(0)} = 0,$$

$$\dot{a}_k^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n^{(0)} H'_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t},$$

$$\dot{a}_k^{(2)} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n^{(1)} H'_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t},$$

...

...

...

(6.26)

$$\dot{a}_k^{(s)} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n^{(s-1)} H'_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t}.$$

Рішенням нульової системи рівнянь, представленої першим рядком в (6.26), є функції $a_k^{(0)} = \text{const}$. Отже, величини $a_k^{(0)}(t)$ повинні збігатися з початковими значеннями для шуканих коефіцієнтних функцій a_k . Тому виберемо їх наступним чином

$$a_m^{(0)} = 1, a_n^{(0)} = 0 \text{ при } n \neq m,$$

тому достовірно відомо, що при $t = 0$ система перебувала в стані з енергією E_m .

Систему рівнянь першого наближення, представлену другим рядком в (6.26), таким чином, можна записати в наступному вигляді:

$$\dot{a}_k^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} H'_{km} e^{i\omega_{km}t}, \quad (6.27)$$

причому величина $|a_k^{(1)}(t)|^2$ дає в першому наближенні імовірність знайти систему в момент часу t в стані k при умові, що в момент $t = 0$ вона знаходилась в стані m .

РОЗДІЛ II. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА ТА ЙОГО ЗАСТОСУВАННЯ ДО РІШЕННЯ ДЕЯКИХ ОДНОМІРНИХ ЗАДАЧ. ТОТОЖНІ ЧАСТИНКИ

§7. Повне рівняння Шредінгера

Рівняння Шредінгера, як стаціонарне, так і повне (тобто яке включає в себе час), а також численні приклади їх використання для вирішення завдань нерелятивістської квантової механіки займають центральне місце в усіх традиційних курсах цієї дисципліни.

З огляду на адресата нашого посібника, ми зрідка в розділі I (§4, §6) зверталися до рівняння Шредінгера, вважаючи, що читач не потребує коментарів з приводу його походження, сенсу і призначення.

У цій главі ми коротко зупинимося на повному рівнянні Шредінгера і деяких загальних важливих наслідків з нього.

Квантово-механічні задачі, в яких основні величини, що характеризують частинку, а саме енергія або хвильова функція $\psi(x)$, не залежать від часу, є задачами на рішення стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}U_n(\vec{r}) = E_n U_n(\vec{r}), \quad (7.1)$$

або в розгорнутому вигляді

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) U_n(\vec{r}) = E_n U_n(\vec{r}) \quad (7.2)$$

Рівняння (7.1) є фактично операторним рівнянням на власні функції U_n і власні значення E_n оператора Гамільтона, який не залежить від часу і представляє собою дужку в лівій частині (7.2). Легко переконатися, що для вільної частинки ($V(\vec{r}) \equiv 0$) рішеннями рівняння (7.2) є функції виду

$$U(\vec{r}, \vec{p}) = C e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r})}, \quad (7.3)$$

де C – довільні постійні.

Однак відомо також, що для пояснення результатів таких важливих експериментів, як, наприклад, дифракція електронів на кристалах, потрібно

використовувати залежні від часу хвильові функції, які відповідають реальним хвилям:

$$\psi(\vec{r}, t) = C e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \vec{r}) - Et}. \quad (7.4)$$

Таким чином, стаціонарне рівняння Шредінгера обмежено в здатності пояснити весь експериментальний матеріал.

Тому його потрібно узагальнити так, щоб воно описувало також і тимчасові ефекти.

Легко бачити, що функція (7.4) задовольняє наступному рівнянню:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t), \quad (7.5)$$

або рівнянню

$$\hat{H}(\vec{r}, i\hbar \vec{\nabla}, t) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t). \quad (7.6)$$

Це є шукане диференціальне рівняння, яке називається повним рівнянням Шредінгера. Правомірність використання його підтверджується наступними міркуваннями. Коли гамільтоніан в (7.6) явно не залежить від часу, з повного рівняння Шредінгера виходять всі результати, які слідує з стаціонарного рівняння. Теорія, заснована на рівнянні (7.6) прекрасно узгоджується з експериментом, і, нарешті, в границі, коли $\hbar \rightarrow 0$, теорія узгоджується з результатами класичної фізики.

Безпосередньою підстановкою легко переконатися, що в окремому випадку, коли гамільтоніан $\hat{H}$ не залежить явно від часу, загальне рішення рівняння (7.6) має вигляд

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n U_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (7.7)$$

де U_n – власні функції гамільтоніана $\hat{H}$, які відповідають енергіям E_n . Вони знаходяться з рішення відповідного стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H} U_n(\vec{r}) = E_n U_n(\vec{r}), \quad (7.8)$$

причому коефіцієнти a_n в розкладанні (7.7) не залежать від часу.

Імовірність P_n знайти квантову систему в момент часу t в стані U_n з енергією E_n дорівнює

$$P_n = |\langle \psi(t) | U_n \rangle|^2 = |a_n|^2.$$

Розглянемо імовірнісну інтерпретацію тимчасової хвильової функції. Нехай $\psi(\vec{r}, t)$ – хвильова функція, яка залежить від часу. Фізична інтерпретація цієї функції абсолютно аналогічна інтерпретації хвильової функції $\psi(\vec{r})$, яка не залежить від часу. Тепер, однак, треба розглянути ймовірність $P(\vec{r}, t)$ знайти частку всередині нескінченно малого об'єму $d^3\vec{r}$ в будь-який даний момент часу t . Постулюється, що ця ймовірність дорівнює

$$P(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}. \quad (7.9)$$

Оскільки ймовірність знайти частку взагалі в якомусь місці простору в момент часу t дорівнює одиниці, має, очевидно, виконуватися умова нормування

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1,$$

а отже, умова

$$\frac{d}{dt} \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 0. \quad (7.10)$$

Останнє співвідношення, яке забезпечує збереження ймовірності, виходить безпосередньо з повного рівняння Шредінгера (7.5) наступним чином. Очевидно,

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \psi d^3\vec{r} = \int \frac{d}{dt} (\psi^* \psi) d^3\vec{r} = \int \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* \right) d^3\vec{r}.$$

Якщо підставити сюди замість похідних $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ і $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$ їх вирази, які отримані з рівняння (7.5), приходимо до співвідношення

$$\frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 d^3\vec{r} = \frac{i\hbar}{2m} \int_V (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) d^3\vec{r}. \quad (7.11)$$

Інтеграл, що стоїть в правій частині, перетворимо, використовуючи теорему Гріна. (Згідно теореми Гріна, для будь-яких двох функцій $f(\vec{r})$ і $g(\vec{r})$ має місце інтегральне співвідношення

$$\int_V (f \nabla^2 g - g \nabla^2 f) d^3\vec{r} = \int_A ((f \vec{\nabla} g - g \vec{\nabla} f) \cdot \vec{n}) da,$$

в якому A – замкнута поверхня, що обмежує довільний об'єм V , $\vec{n}$ – орт нормалі до поверхні, спрямований назовні, $d^3\vec{r}$ і da – відповідно нескінченно малі елементи об'єму і поверхні).

Тоді отримаємо

$$\frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 d^3\vec{r} = \frac{i\hbar}{2m} \int_V (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) d^3\vec{r} = \frac{i\hbar}{2m} \int_A ((\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \cdot \vec{n}) da \quad (7.12).$$

Оскільки функція ψ обертається в нуль на нескінченності, останній інтеграл, який береться по нескінченно віддаленій замкнутій поверхні A , дорівнює 0. Таким чином, отримуємо співвідношення (7.10).

У зв'язку з повним рівнянням Шредінгера природно виникає питання про еволюцію у часі середніх значень операторів фізичних величин. Відомо, що середнє значення (або математичне очікування) фізичної величини визначається формулою

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r}, \quad (7.13)$$

де $\hat{A}$ – квантово-механічний оператор фізичної величини A . Як бачимо, середнє $\langle A \rangle$, взагалі є функцією часу t .

Виходячи безпосередньо з рівняння Шредінгера (7.5), обчислимо похідну за часом від величини $\langle A \rangle$. Використовуючи діраківські позначення (розділ I), можна записати

$$\frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\psi\rangle = |\dot{\psi}\rangle \equiv \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \quad (7.14)$$

Крім цього рівняння, маємо спряжене йому рівняння

$$-\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{H} = \langle \dot{\psi} |. \quad (7.15)$$

Формула (7.13) в діраківських позначеннях запишеться наступним чином:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (7.16)$$

Диференціюючи (7.16) за часом, отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \langle \dot{\psi} | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} | \dot{\psi} \rangle + \langle \psi | \dot{\hat{A}} | \psi \rangle = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{A} \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \dot{\hat{A}} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (7.17)$$

Які коротко можна записати так:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle \quad (7.18)$$

Введемо позначення

$$[\hat{H}, \hat{A}] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}) \quad (7.19)$$

Оператор $[\hat{H}, \hat{A}] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A})$ називається квантовою дужкою Пуассона. Введене позначення дозволяє записати (7.18) у формі

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle \quad)$$

Ми бачимо, що похідна за часом від середнього значення $\langle A \rangle$ є середнім від деякої величини, зміненої оператором $\hat{A}$:

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{A}].$$

Тому цей оператор слід прийняти за оператор $\frac{d\hat{A}}{dt}$ похідної за часом $\frac{dA}{dt}$ від величини A , яка зображується оператором $\hat{A}$:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{A}]. \quad (7.21)$$

Це визначення оператора, який зображує похідну за часом $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$, веде до того, що

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle, \quad (7.22)$$

тобто похідна за часом від середнього дорівнює середньому від похідної за часом.

Знайдемо тепер важливий наслідок з формули (7.20). Він полягає в Теоремі Еренфеста, згідно з якою в квантовій механіці справедливі класичні рівняння руху

$$m \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{p}, \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V, \quad (7.23)$$

якщо тільки класичні величини, які входять до них розуміти як середні значення квантових операторів відповідних фізичних величин. (В (7.23) $V(\vec{r})$ - функція потенціальної енергії).

Доведемо теорему Еренфеста.

Скористаємося формулою (7.20) з урахуванням того, що імпульси і координати явно від часу не залежать. Тоді

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right), x \right] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2, x \right] \rangle = -\frac{i\hbar}{2m} \int \psi^* (\nabla^2 x - x \nabla^2) \psi d^3\vec{r}.$$

Тут було враховано, що $\hat{x} = x$, а оператори $\hat{x}$ і $V(\vec{r})$ комутативні. Оператор, який з'явився $\nabla^2 x$, очевидно, можна розуміти як оператор $x \nabla^2 + 2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)$. Отже,

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi d^3\vec{r} = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle.$$

Ми врахували, що $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ і отримали, таким чином, перше з співвідношень (7.23). Для отримання другого співвідношення (7.23) звернемося знову до формули (7.20). Отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{d\langle p_x \rangle}{dt} &= \langle [\hat{H}, \hat{p}_x] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right), -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \rangle = \langle \left[V, \frac{\partial}{\partial x} \right] \rangle = \\ &= \int \psi^* \left(V \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (V\psi) d^3\vec{r} = - \int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi d^3\vec{r} = - \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle. \end{aligned}$$

При перетвореннях ми врахували очевидне перестановочне співвідношення $\left[V^2, \frac{\partial}{\partial x} \right] = 0$.

Ми переконалися в справедливості і другого співвідношення (7.23).

§8. Гармонійне періодичне збурення. Матриця густини

На додаток до §8 ми розглянемо тут важливий приклад застосування тимчасової теорії збурення і дамо короткий огляд формалізму матриці густини.

Розглянемо конкретний приклад гамільтоніана збурення, який змінюється з часом по простому гармонічному закону:

$$\hat{H}'(t) = \hat{H}' e^{-i\omega t} + (\hat{H}'^+) e^{i\omega t} \quad (8.1)$$

Два доданки у формулі (8.1) необхідно брати, щоб забезпечити ермітовість гамільтоніана збурення. Підставляючи (8.1) в (6.27) і інтегруючи за часом від 0 до t , при $k \neq m$ отримуємо

$$a_k^{(1)}(t) = \int_0^t \left(-\frac{i}{\hbar}\right) H'_{km}(t') e^{i\omega_{km}t'} dt' = -\frac{1}{\hbar} \left(H'_{km} \frac{e^{i(\omega_{km}-\omega)t}-1}{\omega_{km}-\omega} + H'_{km}^* \frac{e^{i(\omega_{km}+\omega)t}-1}{\omega_{km}+\omega} \right) \quad (8.2)$$

Нижню границю інтегрування ми взяли рівною нулю, щоб автоматично врахувати початкову умову $a_k^{(1)}(t) = 0$ при $k \neq m$.

Обмежимося розглядом випадку, коли частота ω близька до абсолютної величини частоти переходу $m \rightarrow k$, тобто до величини $|\omega_{km}|$, тому що $\hbar\omega \cong |E_k - E_m|$. Тоді, згідно з (8.2), для ймовірності переходу зі стану m в стан k за час від 0 до t отримаємо наступну наближену формулу:

$$\left| a_k^{(1)} \right|^2 \cong \frac{4|H'_{km}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}\pm\omega)t\right]}{(\omega_{km}\pm\omega)^2}. \quad (8.3)$$

У цій формулі слід брати знак мінус, якщо $\omega_{km} \cong \omega$, і знак плюс, якщо $\omega_{km} \cong -\omega$. Перехресні члени зі знаменником виду $(\omega_{km} + \omega)(\omega_{km} - \omega)$ ми відкинули, тому що при $\omega \cong |\omega_{km}|$ їх внесок дуже малий.

Перший доданок в правій частині формули (8.2) домінує над другим, коли $\hbar\omega = E_k - E_m$, тобто, $E_k > E_m$. Навпаки, другий доданок в (8.2) домінує над першим, коли $\hbar\omega \cong E_m - E_k$ і, отже, коли $E_k < E_m$. Таким чином, гармонічне періодичне збурення може викликати переходи як вниз, так і вгору зі стану m в стан k . Енергія стану k відрізняється від енергії стану m на величину, приблизно рівну $\hbar\omega$.

Виведемо тепер формулу для ймовірності переходу зі стану m в континуальну групу станів, близьких по енергії до стану k , припустивши для визначеності, що $E_k > E_m$. Позначимо $\rho(\omega_{km})$ густину таких кінцевих станів, тобто число станів, що припадають на одиничний інтервал частот. Оскільки тепер $\omega_{km} \cong \omega$, у формулі (8.3) треба взяти знак мінус. Так приходимо до такої формули:

$$\left| a_k^{(1)} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} |H'_{km}|^2 \frac{\sin^2\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t\right]}{\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)\right]^2} \rho(\omega_{km}) d\omega_{km} \quad (8.4)$$

Якщо величина $|H'_{km}|^2$ слабо залежить від кінцевого стану k , то її можна винести з-під знака інтеграла. Тоді в підінтегральному виразі залишиться множення наступних двох множників:

$$g(\omega_{km}, t) = \frac{\sin^2\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t\right]}{\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)\right]^2} \text{ і } \rho(\omega_{km}).$$

На рисунку 8.1 наведені графіки функцій $g(\omega_{km})$ і $\rho(\omega_{km})$. В якості незалежної змінної взято величину ω_{km} .

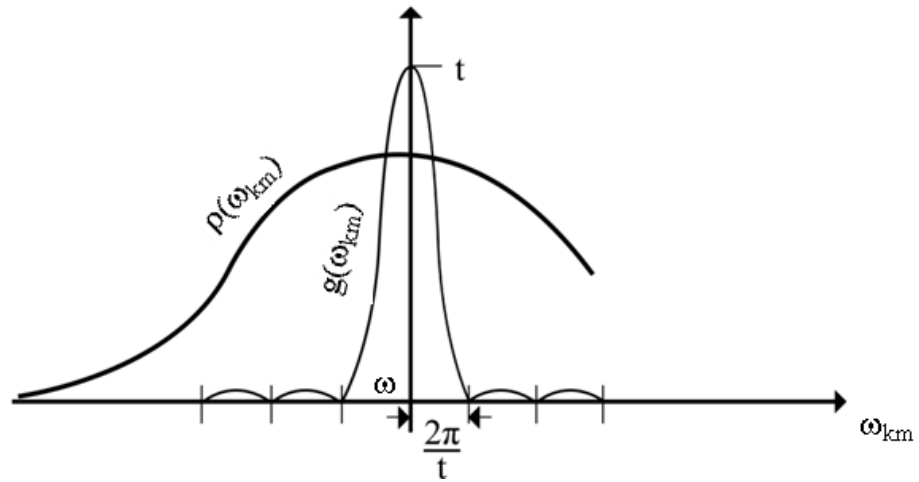


Рис.8.1 Графіки функцій $g(\omega_{km}, t)$ і $\rho(\omega_{km})$

Інтервал, на якому в основному зосереджена функція $g(\omega_{km}, t)$ дорівнює по порядку величини $\frac{2\pi}{t}$. Його можна зробити як завгодно малим, збільшуючи час спостереження t . Площа під графіком функції $g(\omega_{km}, t)$ дорівнює

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t\right]}{\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)\right]^2} d\omega_{km} = 2\pi t \quad (8.5)$$

Розглянемо випадок, коли час t досить великий, щоб величина $\frac{2\pi}{t}$, що характеризує «ширину» функції $g(\omega_{km}, t)$, була менше «ширини» $\Delta\omega$ функції $\rho(\omega_{km})$. Інтервал в (8.4) можна тоді наближено обчислити. Це дає

$$\left|a_k^{(1)}(t)\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |H'_{km}|^2 \rho(\omega) \Big|_{\omega=\omega_{km}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t\right]}{\left[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)\right]^2} d\omega_{km} =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar^2} |H'_{km}|^2 \rho(\omega) |_{\omega=\omega_{km}} t, \quad (8.6)$$

оскільки в даному випадку з-під знака інтеграла можна винести функцію $\rho(\omega_{km})$, взявши її в точці $\omega_{km} = \omega$.

Імовірність квантового переходу $m \rightarrow k$ в одиницю часу дається формулою

$$W_{m \rightarrow k} = \frac{d}{dt} \left| a_k^{(1)}(t) \right|^2 \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{km}|^2 \rho(E) |_{E=E_m \pm \hbar\omega}, \quad (8.7)$$

тут $\rho(E)$ позначає густину кінцевих станів по енергії E (так що $\rho(\omega) = \hbar \rho(E)$). Знак мінус у формулі (8.7) слід взяти при $E_k < E_m$, коли домінуючим виявляється другий доданок формули (8.2).

Формула (8.7) справедлива також і для ймовірності переходу зі стану $|m\rangle$ в один єдиний стан $|k\rangle$, який належить континууму станів. Тоді формула має бути подана у вигляді

$$W_{m \rightarrow k} = \frac{d}{dt} \left| a_k^{(1)}(t) \right|^2 \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{km}|^2 \delta(E_k - E_m - \hbar\omega) \quad (8.8)$$

Коли $E_k - E_m \cong -\hbar\omega$, в аргументі δ -функції величину $\hbar\omega$ слід додавати, а не віднімати. При виведенні формули (8.8) використаний той факт, що при досить великих t , функцію $\frac{\sin^2\left(\frac{xt}{2}\right)}{\left(\frac{x}{2}\right)^2}$ можна замінити на $2\pi t \delta(x)$,

тому що приймає безперервні значення.

Формулу (8.7) часто називають «золотим правилом» Фермі. Використовуючи цю формулу, завжди слід пам'ятати, що вона дає можливість переходу з одного стану m в континуум станів k , необхідно користуватися вихідною формулою (8.3).

У висновку зазначимо, що обмежуючись першим порядком теорем збурень, можна прийти до умови

$$\frac{|H'_{km}|}{\hbar} \ll \frac{1}{t} \ll \nabla\nu,$$

яка встановлює межі застосовності формули (8.8) і «золотого правила» Фермі.

У другій частині цього параграфу ми розглянемо формалізм матриці густини.

Цей формалізм широко використовується в сучасній теорії при описі тимчасової еволюції великих квантових систем, що складаються з великої кількості ідентичних (тотожних) часток. З його допомогою дуже зручно робити усереднення по ансамблю частинок.

Розглянемо хвильову функцію $\psi(\vec{r}, t)$ ізольованою окремою атомною системою. Ця функція задовольняє рівнянню Шредінгера

$$\hat{H}(t)\psi(\vec{r}, t) = \hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (8.9)$$

і її можна розкласти по довільному повному набору ортонормованих функцій $U_n(\vec{r})$:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) U_n(\vec{r}) = \sum_n C_n |n\rangle, \quad (8.10)$$

причому $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$.

З (8.10) безпосередньо знаходимо

$$C_n = \int U_n^* \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} \equiv \langle n|\psi\rangle \quad (8.11)$$

Середнє значення будь-якої фізичної величини A в стані $\psi(\vec{r}, t)$ обчислюється за формулою (7.13)

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d^3\vec{r} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (8.12)$$

З використанням формули (1.29) звідси отримуємо

$$\langle A \rangle = \sum_n \sum_m \langle \psi | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n \sum_m C_m^* C_n A_{mn} \quad (8.13)$$

Формула (8.13) відноситься до ізольованої окремої атомної системи (надалі ми її будемо називати просто «атомом»).

На практиці, однак, в більшості реальних фізичних експериментів ми маємо справу не з єдиною атомною системою, а з системами, що складаються з величезного числа однакових атомів, тобто, як правило, з ансамблем ідентичних атомних систем. Для них ми вимірюємо не саму величину $\langle A \rangle$, а величину $\overline{\langle A \rangle}$, усереднену по ансамблю однакових систем. Відповідне середнє ми позначаємо рисою зверху:

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_n \sum_m \overline{C_m^* C_n} A_{mn} \quad (8.14)$$

Зручно ввести величину

$$\rho_{mn} \equiv \overline{C_n C_m^*} \quad (8.14)$$

$$\rho_{nm} = \overline{\langle n | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle} \quad (8.15)$$

використовуючи яку, отримуємо замість (8.14)

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_n \sum_m \rho_{nm} A_{mn} = \sum_n (\rho A)_{nn} = S_p(\rho A) \quad (8.16)$$

Безпосередньо з формул (8.15) і визначення операції множення матриць видно, що величини ρ_{nm} можна розглядати як матричні елементи nm для оператора

$$\hat{\rho} = \overline{|\psi\rangle\langle\psi|}, \quad (8.17)$$

який називається оператором густини.

Згідно (8.14), маємо очевидне співвідношення $\rho_{nm}^* = \rho_{mn}$, так що оператор $\hat{\rho}$ ермітів.

Часто виникає необхідність розглядати диференціальне рівняння, якому задовольняє оператор $\hat{\rho}(t)$. Складемо це рівняння. Диференціюючи за часом формулу (8.17), отримаємо

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \overline{|\dot{\psi}\rangle\langle\psi|} + \overline{|\psi\rangle\langle\dot{\psi}|} \quad (8.18)$$

Рівняння Шредінгера (8.9) можна записати у вигляді

$$|\dot{\psi}\rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\psi\rangle \quad (8.19)$$

Використовуючи ермітовість оператора $\hat{H}$, з рівняння (8.19) можна отримати ще одне рівняння

$$\langle\dot{\psi}| = -\frac{1}{i\hbar} \langle\psi| \hat{H} \quad (8.20)$$

(Рівняння (8.20) в силу ермітовості оператора $\hat{H}$ означає, що

$$\langle\dot{\psi}|f\rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle\psi|\hat{H}|f\rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle\hat{H}|\psi|f\rangle = \left\langle -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \middle| f \right\rangle,$$

де f – довільна функція. Остання рівність очевидна в силу (8.19)).

Підставляючи (8.20) і (8.19) в (8.18) приходимо до рівняння

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \overline{|\psi\rangle\langle\psi|} - \frac{1}{i\hbar} \overline{|\psi\rangle\langle\psi|} \hat{H} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \overline{|\psi\rangle\langle\psi|}], \quad (8.21)$$

де квадратні дужки позначають комутатор операторів. Таким чином, з використанням (8.17) остаточно приходимо до диференціального рівняння

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (8.22)$$

для оператора густини $\hat{\rho}$.

На практиці зазвичай доводиться мати справу не з рівнянням (8.22), а з системою рівнянь

$$\frac{d\rho_{nm}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]_{nm} + \text{Релаксаційні члени}, \quad (8.23)$$

де в праві частини додані феноменологічні так звані релаксаційні члени, щоб врахувати дисипативні властивості ансамблю систем.

§9. Проходження частинки через потенційний бар'єр.

У розділі IV ми розглянули важливий приклад точно розв'язуваної квантово-механічної задачі про квантовий лінійний гармонійний осцилятор. Не менш важливе місце займає в фізиці так званий тунельний ефект, явище інфінітивного руху, при якому частка проходить потенційне поле, непереборне з точки зору класичної фізики, (потенціальний бар'єр), зображений на рисунку 9.1.

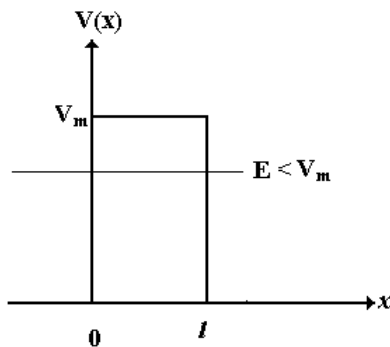


Рис.9.1

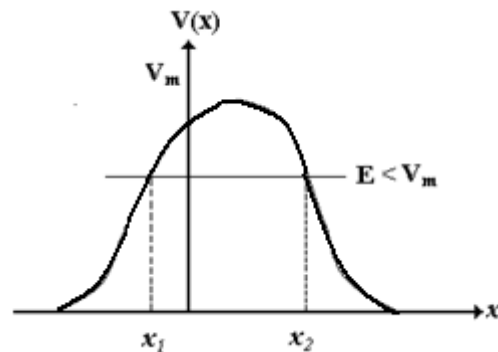


Рис.9.2

Зазначені на цьому рисунку умови мають місце, наприклад, для кульки, що рухається по поверхні випуклої форми (в даному випадку неправильної) в полі сили тяжіння. Відповідно до законів класичної фізики, кулька або «відіб'ється» від опуклості, якщо його енергія $E < V_m$, або з достовірністю пройде через опуклість при $E > V_m$. Однак, квантова механіка передбачає

зовсім інший результат: при будь-якій енергії частка має ймовірність $0 < W < 1$ пройти через потенціальний бар'єр.

Обчислимо ймовірність проходження мікрочастинок через потенційний бар'єр найпростішої форми (рис.9.2)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_m, & 0 \leq x \leq l \\ 0, & x > l \end{cases} \quad (9.1)$$

Будемо шукати стаціонарні стани частинки, що рухається в полі такого бар'єру, на підставі рішення рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (9.2)$$

Ввівши оптичні позначення

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k_0^2 n^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \quad (9.3)$$

Запишемо рівняння (9.2) для трьох областей у вигляді:

$$\psi_I'' + k_0^2 \psi_I = 0 \quad (9.4')$$

$$\psi_{II}'' + k_0^2 n_m^2(x) \psi_{II} = 0 \quad (9.4'')$$

$$\psi_{III}'' + k_0^2 \psi_{III} = 0 \quad (9.4''')$$

Рішення рівняння (9.4) має вигляд:

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x} \quad (9.5')$$

$$\psi_{II}(x) = \alpha e^{ik_0 n_m x} + \beta e^{-ik_0 n_m x} \quad (9.5'')$$

$$\psi_{III}(x) = ae^{ik_0x} + be^{-ik_0x}, \quad (9.5''')$$

де A, B, α, β, a і b – довільні постійні.

Для того, щоб спільні рішення трьох незалежних рівнянь (9.4) утворили якусь одну хвильову функцію, яка описує рух частинки, яка рухається в силовому полі $V(x)$, вони повинні бути «зшиті» на краях потенційного бар'єру. Крайові умови полягають в безперервності функцій ψ і їх перших похідних:

$$\left. \begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0), & \psi_I'(0) &= \psi_{II}'(0), \\ \psi_{II}(l) &= \psi_{III}(l), & \psi_{II}'(l) &= \psi_{III}'(l) \end{aligned} \right\} \quad (9.6)$$

Умови (9.6) приведуть до чотирьох рівнянь щодо шести коефіцієнтів, що фігурують в (9.5). Розглянемо для визначеності випадок падіння частинок

на бар'єр зліва, тобто візьмемо $b = 0$. Крім того, без будь-яких обмежень можна прийняти $A = 1$. Тоді отримаємо систему рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} 1 + B &= \alpha + \beta, \\ 1 - B &= n_m(\alpha - \beta), \\ \alpha e^{ik_0 n_m l} + \beta e^{-ik_0 n_m l} &= \alpha e^{ik_0 l} \\ n_m(\alpha e^{ik_0 n_m l} - \beta e^{-ik_0 n_m l}) &= \alpha e^{ik_0 l} \end{aligned} \right\} \quad (9.7)$$

Із системи (9.7) знаходимо:

$$\alpha = \frac{2e^{-ik_0 n_m l}(1+n_m)}{e^{-ik_0 n_m l}(1+n_m)^2 - e^{ik_0 n_m l}(1-n_m)^2}, \quad (9.8)$$

$$\beta = \frac{2e^{ik_0 n_m l}(n_m-1)}{e^{-ik_0 n_m l}(1+n_m)^2 - e^{ik_0 n_m l}(1-n_m)^2}, \quad (9.9)$$

$$B = \frac{(e^{-ik_0 n_m l} - e^{ik_0 n_m l})(1-n_m^2)}{e^{-ik_0 n_m l}(1+n_m)^2 - e^{ik_0 n_m l}(1-n_m)^2}, \quad (9.10)$$

$$\alpha e^{ik_0 l} = \frac{4n_m}{e^{-ik_0 n_m l}(1+n_m)^2 - e^{ik_0 n_m l}(1-n_m)^2}. \quad (9.11)$$

Потоки частинок у хвилі падаючої (j_0), відображеної (j_r) і яка проходить (j_d) обчислюється за формулою густини струму як:

$$j_0 = \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 = \frac{\hbar k_0}{m}, \quad j_r = -\frac{\hbar k_0}{m} |B|^2, \quad j_d = \frac{\hbar k_0}{m} |a|^2 \quad (9.12)$$

Всі ці величини дозволяють обчислити (9.10) і (9.11), як для випадку $E > V_m$ (n_m – дійсний), так і для випадку $E < V_m$ (n_m – уявний).

Відношення потоку відображених частинок до потоку падаючих

$$\frac{|j_r|}{j_0} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = |B|^2 = R \quad (9.13)$$

називають коефіцієнтом відображення. А вираз

$$\frac{j_d}{j_0} = \frac{|a|^2}{|A|^2} = |a|^2 = D \quad (9.14)$$

називають коефіцієнтом прозорості бар'єра.

Із закону збереження числа частинок (рівняння безперервності для струму) випливає:

$$R + D = 1 \quad (9.15)$$

Мовою ймовірності це означає що ймовірність суми двох несумісних подій (відображення від бар'єру і проникнення в нього) дорівнює 1.

Принаймні, по класичній механіці, якщо $E > V_m$ повинно мати місце $R = 0, D = 0$: бар'єр абсолютно прозорий. Але з (9.10) випливає, що $|B|^2 \neq 0$, тому в квантовій механіці $R > 0, D < 0$. Частинка частиною відбивається так само, як відображаються світлові хвилі на границі двох середовищ.

Якщо $E < V_m$, то по класичній механіці має місце точне обмеження $D = 0, R = 1$. Тобто частинки зовсім не проникають всередину бар'єру. В оптиці такий випадок відповідає повному внутрішньому віддзеркаленню. Згідно геометричній оптиці промені світла не проникають в другу середу.

Більш детальний розгляд на основі хвильової оптики показує, що в дійсності світлове поле при повному відбитті проникає в середовище, від якого відбувається відображення, і може частково пройти через нього, якщо воно являє собою дуже тонку пластинку. Квантова механіка у випадку $E < V_m$ призводить до висновку, аналогічному висновку хвильової оптики. Дійсно, в цьому випадку n_m є чисто уявною величиною, як це випливає з (9.3) Тому покладемо

$$n_m = i|n_m| = i\sqrt{\frac{V_m - E}{E}} \quad (9.16)$$

Якщо внести цей вираз до (9.11) і вважаючи $e^{ik_0|n_m|l} \gg 1$, отримаємо:

$$D = |a|^2 = \frac{16|n_m|^2}{(1+|n_m|^2)^2} e^{-ik_0|n_m|l} \quad (9.17)$$

Якщо позначити дробовий множник через D_0 (він не дуже відрізняється від 1) і маючи на увазі значення k_0 (Див. (9.3)), отримаємо:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_m - E)} l\right) \quad (9.18)$$

Коефіцієнт D називають також коефіцієнтом тунелювання за назвою даного явища.

Очевидно, що тунельний ефект матиме помітне значення лише в тих випадках, коли D не надто малий, тобто коли:

$$\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_m - E)} l \approx 1. \quad (9.19)$$

Неважко бачити, що з тунельним ефектом можна зустрітися лише в області мікроскопічних явищ. Так, наприклад, для $V_m - E \sim 10$ еВ, $m \sim 10^{-27}$ г і $l \sim 10^{-8}$ см, з (9.18) отримаємо $D \approx e^{-1}$.

Формулу (9.18) легко узагальнити на випадок потенційного бар'єру довільної форми. Якщо область (x_1, x_2) бар'єру довільної форми, зображеного на рисунку 1, розбити на елементарні прямокутні бар'єри шириною dx і висотою $V(x)$, то тунельовані частинки з енергією E на проміжку (x_1, x_2) повинні звестися до послідовного тунелювання через систему елементарних бар'єрів на цьому проміжку. Для кожного такого бар'єру коефіцієнт прозорості

$$D' = D'_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right).$$

З огляду на імовірнісний сенс коефіцієнта D , отримаємо:

$$D = \Pi D' = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right). \quad (9.20)$$

Розглянемо два приклади, які ілюструють прояв тунельного ефекту в явищах, що відбуваються на мікрорівні.

1. Холодна емісія електронів з металу.

Якщо до металу прикласти сильне електричне поле (близько $10^6 \frac{B}{cm}$) так, щоб він був катодом, то таке поле вириває електрони і виникає електричний струм. Це явище носить назви «холодної емісії». Розглянемо теорію цього ефекту. Розглянемо спочатку картину руху електронів в металі коли зовнішнє поле відсутнє.

Щоб видалити електрон з металу, потрібно виконати деяку роботу. Отже, потенційна енергія електрона в металі менша, ніж поза металу. Найбільш простим чином цей факт може бути виражений, якщо застосовувати потенційну енергію електрона $V(x)$ всередині металу, яка дорівнює 0, а поза метала дорівнює $C > 0$, так що потенціальна енергія має вигляд, зображений на рисунку 9.3.

$$V'(x) = V(x) - e\mathcal{E}x = C - e\mathcal{E}x, \quad x > 0 \quad (9.21)$$

$$V'(x) = 0, \quad x < 0.$$

Графік потенційної енергії (9.21) зображений на рисунку 3. Його частина, яка відповідає $x > 0$, зображена пунктиром. Зауважимо, що всередині металу не можна створити великого поля, тому зміна $V(x)$ відбудеться лише поза металу.

Ми бачимо, що утворюється потенційний бар'єр. За класичною механікою електрон міг би пройти через бар'єр лише в тому випадку, якщо його енергія $E > C$. Таких електронів в металі дуже мало (вони обумовлюють малу термоелектронну емісію). Тому ніякого електронного струму за класичною механікою при накладенні поля виникнути не повинно. Однак, якщо $\mathcal{E}$ досить велике, то бар'єр буде вузьким, і ми будемо мати справу з різкою зміною потенційної енергії, і класична механіка не може бути застосована: електрон буде проходити через потенційний бар'єр.

Обчислимо коефіцієнт прозорості цього бар'єру для електронів, що мають енергію руху по осі OX , рівну E_x . Згідно (9.20) задача зводиться до обчислення інтеграла

$$S = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V'(x) - E_x)} dx,$$

де x_1 і x_2 – координати точок повороту. Ці точки відзначені на малюнку 3.

$x_1 = 0$, а x_2 знайдеться з рівності

$$E_x = C - e\mathcal{E}x_2,$$

звідси

$$x_2 = \frac{C - E_x}{e\mathcal{E}}.$$

Отже

$$S = \int_0^{\frac{C - E_x}{e\mathcal{E}}} \sqrt{2m(C - e\mathcal{E}x - E_x)} dx. \quad (9.22)$$

Введемо змінну інтегрування $\xi = \frac{e\mathcal{E}}{C - E_x} x$. Тоді отримаємо

$$S = \sqrt{2m} \frac{(C - E_x)^{3/2}}{e\mathcal{E}} \int_0^1 \sqrt{1 - \xi} d\xi = \frac{2}{3} \sqrt{2m} \frac{(C - E_x)^{3/2}}{e\mathcal{E}} \quad (9.23)$$

Таким чином

$$D(E_x) = D_0 \exp \left\{ -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{(C-E_x)^{3/2}}{e\mathcal{E}} \right\} \quad (9.24)$$

Коефіцієнт цей різний для різних E_x , але оскільки $C > E_x$, то середній (по енергії електронів) коефіцієнт прозорості матиме вигляд

$$\bar{D} = \bar{D}_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}}, \quad (9.25)$$

де D_0 і ε_0 – константи, що залежать від роду металів. Струм холодної емісії дорівнюватиме

$$j(\varepsilon) = j_0 \bar{D} = A e^{-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}} \quad (9.26)$$

2. α -розпад атомних ядер.

α -розпадом атомних ядер називають радіоактивні перетворення атомних ядер, що супроводжується випусканням α -частинок (ядер гелію ${}^4_2\text{He}$). Ядро до акту розпаду можна представляти як сферичну потенційну яму, в якій знаходиться одна α -частинка. (Це припущення не є обов'язковим. Можливо, що перед вильотом з ядра, α -частинка утворюється з більш простих частинок: нейтронів, і протонів. Такий підхід, безумовно, ускладнює теорію, і ми не будемо його тут розглядати). Крива залежності потенційної енергії α -частинки від відстані r від центру мас дочірнього атомного ядра схематично показано на рисунку 9.4.

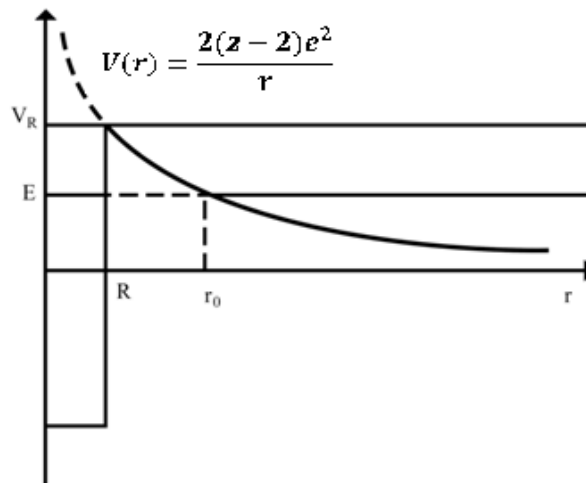


Рис 9.4

Поведінка прямої при великих r визначається кулонівським відштовхуванням електричних зарядів α -частинки ($q_1 = 2e$) і дочірнього ядра ($q_2 = (Z - 2)e$), а при малих $r < R$ (де $R \cong 10^{-12}$ см) переважну роль

відіграють ядерні сили тяжіння. Можна вважати, що частинка, енергія якої $E < V_R$, перебуваючи в потенційній ямі, «відскакує» то від однієї, то від іншої його стінки; при цьому існує дуже мала ймовірність тунелювання частинки через бар'єр, тобто часткового її виходу з ями при кожному «ударі» об стінку. Ймовірність тунелювання α -частинки в одиницю часу (постійна розпаду α — величина, зворотна середньому часу життя радіоактивного ядра) дорівнює числу зіткнень зі стінками ями в одиницю часу, помноженому на вірогідність тунелювання при одному акті відображення. Частота зіткнень частинки зі стінками ями дорівнює $\frac{v}{2R}$, де v - одиниця швидкості частинки в ямі. Тому

$$\lambda = \frac{v}{2R} D. \quad (9.27)$$

На підставі (9.20) отримаємо

$$\lambda = \frac{v}{2R} D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_R^{r_0} \sqrt{2m(V(r) - E)} dr \right\} \quad (9.28)$$

З малюнка 4 видно, що R є радіус ядра, а r_0 визначиться з умови

$$\frac{2(Z-2)e^2}{r_0} = E, r_0 = \frac{2(Z-2)e^2}{E}. \quad (9.29)$$

Нескладне інтегрування призводить до результату

$$\ln \lambda = -\frac{4ne^2(Z-2)}{\hbar v} + \frac{4e\sqrt{m}}{\hbar} \sqrt{(Z-2)R} + \ln \frac{\hbar D_0}{2mR^2} \quad (9.30)$$

Найбільш чудовим в цьому висновку є залежність між λ і швидкістю α -частинки v . Подібна залежність ще задовго до квантової теорії α -розпаду була встановлена законом Гейгера-Неттола.

§10. Системи тотожних частинок

Будемо називати однаковими частинки, що мають однакову масу m , заряд e , спин s і т.д., так що в рівних умовах (зовнішнє поле, присутність інших частинок) такі частинки поведуться однаковим чином.

З точки зору атомізму природно, але не потрібно вважати, що всі екземпляри частинок одного роду (електрони, протони, нейтрони і т.д.) між

собою тотожні. Справді, вимір величин, які характеризують частки (m, e, s) , проводиться, звичайно, лише з деякою точністю $(\Delta m, \Delta e, \Delta s)$, і тому завжди законно припускати, що, принаймні, в межах точності вимірювання, різні екземпляри можуть відрізнятися один від одного.

Однакові або не однакові всі екземпляри одного роду, можна було б вирішити лише в тому випадку, якщо б поведінка сукупності однакових частинок якісно відрізнялася від поведінки сукупності різних, хоча б і як завгодно мало, частинок. Саме до такої якісної відмінності властивостей сукупності однакових часток від властивостей сукупності різних частинок призводить квантова механіка. Тому, спираючись на квантову механіку і досвід, можна вирішити на перший погляд невирішене питання про те, чи тотожні один одному всі представники частинок одного роду.

Позначимо масу частинок через m , енергію в зовнішньому полі через $V(q_k, t)$, а енергію взаємодії k -й і j -й частинок через $W(q_k, q_j)$, тоді гамільтоніан системи таких частинок буде мати вигляд

$$\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \sum_{k=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_k + V(q_k, t) \right] + \sum_{k>j=1}^N W(q_k, q_j) \quad (10.1)$$

Виходячи з (10.1), легко зрозуміти, в чому полягає обов'язкова і найбільш загальна особливість гамільтоніана системи однакових частинок. А саме

$$\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t). \quad (10.2)$$

Ця властивість полягає в тому, що гамільтоніан системи однакових частинок інваріантний щодо перестановки координат лівої пари частинок.

Введемо так званий оператор перестановки частинок $\hat{P}_{kj}$, дія якого на функцію $f(\dots, q_k, \dots, q_j, \dots)$ полягає в наступному

$$\hat{P}_{kj} f(\dots, q_k, \dots, q_j, \dots) = f(\dots, q_j, \dots, q_k, \dots) \quad (10.3)$$

Очевидно, що

$$\hat{P}_{kj} \hat{H} = \hat{H} \hat{P}_{kj} \quad (10.4)$$

Спираючись на цю властивість комутації операторів $\hat{P}_{kj}$ і $\hat{H}$, легко показати, що, якщо функція $\psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ задовольняє рівнянню Шредінгера, то функція $\psi' = \hat{P}_{kj} \psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ також буде рішенням цього рівняння, і, отже, ψ' поряд з ψ представляє один з можливих станів системи. Воно відрізняється від попереднього ψ тим, що k -та частинка знаходиться тепер в стані, який раніше займався j -тою частинкою, а j -та займає тепер стан k -тої.

Продовжуючи перестановки, ми можемо отримати нові можливі стани системи $\psi'', \psi''', \dots$, що відрізняються один від одного розподілом частинок по станах.

Однак вказуючи номер частинки і стан, в якому вона знаходиться, ми зустрічаємося з однією трудностю. Вона полягає в тому, що, ставши на атомістичну точку зору, ми повинні визнати, що говорити про траєкторію мікрочастинки в квантовій механіці принципово неможливо. Тому розрізнення частинок по станах є надуманою проблемою, тобто не можна говорити про те, яка саме частинка в даний момент часу знаходиться в певному стані. Іншими словами, стани сукупності однакових часток завжди такі, що можна говорити лише про стан всієї сукупності в цілому, а не про розподіл частинок по станам. Це виправдане припущення формулюється у формі принципу тотожності: в сукупності однакових частинок реалізуються лише такі стани, які не змінюються при обміні однакових частинок.

Подальші міркування ми проведемо, на прикладі системи двох тотожних частинок.

Нехай є система, що складається з двох не взаємодіючих тотожних частинок 1 і 2, для яких окремо справедливі рівняння

$$\begin{aligned}\hat{H}(1)\psi_\alpha(1) &= E_1\psi_\alpha(1), \\ \hat{H}(2)\psi_\beta(2) &= E_2\psi_\beta(2),\end{aligned}\tag{10.5}$$

де ψ_α і ψ_β – будь-які дві власні функції деякого одночасткового гамільтоніана $\hat{H}$. Позначення, що використовується, наприклад $\psi_\alpha(1)$, вказує

що враховується залежність хвильової функції частинки 1 як від просторових координат, так і від спінової координати. Оскільки ми припускаємо, що частинки не взаємодіють, гамільтоніан повної системи має вигляд

$$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) \quad (10.6)$$

З (10.5) і (10.6) безпосередньо випливає, що функція $\psi(1,2) = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$ є розв'язком повного рівняння Шредінгера двочасткової системи

$$\hat{H}(1,2)\psi(1,2) = (E_1 + E_2)\psi(1,2),$$

відповідним власному числу $E_1 + E_2$. Рішеннями цього рівняння з тим же самим власним числом будуть також і функції

$$\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2), \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \pm \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)], \quad \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1).$$

Виникає питання: яке з цих парних рішень правильне? Співвідношення (10.4) стосовно двочасткової системи має вигляд

$$\hat{P}_{12}\hat{H}(1,2) = \hat{H}(1,2)\hat{P}_{12} \quad (10.7)$$

З (10.7) випливає, що оператори $\hat{P}_{12}$ і $\hat{H}(1,2)$ мають загальний набір власних функцій. Нехай $\psi(1,2)$ - деяка власна функція оператора $\hat{P}_{12}$, тобто

$$\hat{P}_{12}\psi(1,2) = \lambda\psi(1,2), \quad (10.8)$$

де λ – власне число (власне значення) оператора $\hat{P}_{12}$. З (10.8) безпосередньо отримуємо:

$$\hat{P}_{12}^2\psi(1,2) = \lambda^2\psi(1,2) = \psi(1,2), \quad (10.9)$$

бо діючи по черзі два рази оператором перестановки на функцію, ми повертаємося до вихідної функції. Рівність (10.9) показує, що

$$\lambda^2 = 1, \lambda = \pm 1,$$

тому функція $\psi(1,2)$ повинна бути або симетричною (при $\lambda = 1$), або антисиметричною (при $\lambda = -1$) по відношенню до перестановки в ній аргументів обох частинок. Позначаючи символом ψ_s симетричну функцію і символом ψ_a антисиметричну, запишемо рівняння

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}\psi_s(1,2) &= \psi_s(1,2), \\ \hat{P}_{12}\psi_a(1,2) &= -\psi_a(1,2). \end{aligned} \quad (10.10)$$

Для двочасткової системи, що складається з двох тотожних не взаємодіючих частинок, одна з яких знаходиться в стані ψ_α , а інша – в стані ψ_β , є як симетрична, так і антисиметрична власній функції:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1) \psi_\beta(2) + \psi_\alpha(2) \psi_\beta(1)] \quad (10.11)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1) \psi_\beta(2) - \psi_\alpha(2) \psi_\beta(1)] \quad (10.12)$$

Вирази (10.11) і (10.12) відображають принципову можливість побудови двох функцій для двочасткової системи.

Однак, експерименти показують, що системи, що складаються з тотожних частинок з напівцілим спіном (тобто $s_z = \frac{\hbar}{2}, \frac{3}{2}\hbar, \frac{5}{2}\hbar, \dots$), наприклад, з електронів, протонів, нейтронів, описується антисиметричними (відносно перестановки аргументів окремих частинок) хвильовими функціями. Частинки такого типу називають ферміонами.

Системи, що складаються, наприклад, з фотонів, α -частинок і будь-яких інших тотожних частинок з цілим спіном (для них $s_z = 0, \hbar, 2\hbar, \dots$) описуються симетричними функціями. Частинки такого типу називаються бозонами.

Хвильові функції системи, що складаються більш ніж з двох ферміонів, можна будувати так само, як побудована вище двохелектронна функція ψ_a . Функція повинна змінювати знак при перестановці аргументів будь-яких двох частинок і переходити в нуль, коли будь-які дві частинки займають один і, то ж квантовий одночастковий стан. Таку нормовану хвильову функцію можна записати компактно у вигляді так званого слетерівського детермінанта:

$$\psi_a = (1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \cdots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \cdots & \psi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix}, \quad (10.13)$$

де числа $1, 2, \dots, N$, які взяті в дужки, позначають повні набори координат окремих частинок, а індекси $1, 2, \dots, N$ – різні одночасткові власні стани.

При перестановці в детермінанті (10.13) координат будь-яких двох частинок знак функції ψ_a змінюється, оскільки ми переставляємо два стовпця детермінанта. Крім того, якщо в детермінанті (10.13) якісь дві одночасткові власні функції однакові, тобто ці два власних стани мають однакові набори власних квантових чисел (з урахуванням також спінового квантового числа), то хвильова функція $\psi_a = 0$. Це відбувається з тієї причини, що при наявності двох ідентичних станів в детермінанті з'являться два однакових рядки, а такий детермінант дорівнює нулю.

Розкладання детермінанта (10.13) містить $N!$ доданків, кожний з яких представляє собою множення N одночасткових хвильових функцій. Кожний з $N!$ цих доданків відповідає одній певній послідовності розташування номерів N частинок. Таким чином, $N!$ множень в сумі (10.13) відповідає всім $N!$ перестановкам N частинок по N станам. Типове множення має вигляд: $\psi_1(3)\psi_2(4) \dots \psi_N(m)$. У ньому частинка 3 поміщена в стан 1, частинка 4 – в стан 2 і т.д.

Антисиметрія багатоферміонних хвильових функцій проявляється, зокрема, в тому, що власна функція ψ_a переходить в нуль, коли будь-які дві частинки займають один і той же стан. Це твердження називають «принципом заборони Паулі».

Принцип Паулі є безпосереднім наслідком постулату про антисиметрії ферміонної хвильової функції. Ухвалення цього положення в квантовій механіці, не призводить ні до яких внутрішніх протиріч.

Симетричні власні функції, які призначені для опису систем бозонів, можна будувати за аналогією зі слетерівськими детермінантами, тільки потрібно в розкладанні слетерівського детермінанта замінити всі знаки мінус, що з'являються на знаки плюс. Тому, зокрема, можна будувати симетричні хвильові функції, в яких дві (або навіть всі) одночасткові хвильові функції однакові. Це легко бачити на прикладі простої двохбозонної системи, яка описується функцією (10.11). Функція ψ_s не переходить в нуль, якщо $\alpha = \beta$.

Принцип антисиметрії і симетрії багаточасткових хвильових функцій призводить до глибоких фізичних наслідків. Розглянемо, наприклад, енергію багатоферміонної системи в граничному випадку нульової температури. Згідно з квантовою механікою, при нульовій температурі частинка розподіляється за доступними для неї станами таким чином, щоб повна енергія системи була найменшою за умови виконання принципу Паулі. При $T = 0$ найнижчою енергією володіє невироджений стан системи ферміонів (тобто стан, для якого тільки одна власна функція зіставляється кожному власному числу); він будується наступним чином.

Помістимо одну частинку в стан ψ_0 з найнижчою енергією E_0 . Відповідно до принципу Паулі другу частинку ми можемо помістити тільки в наступний за енергією стан, скажімо, з енергією E_1 . Третю частинку потрібно помістити ще вище і т.д. Таким чином, побудуємо стан, який при нехтуванні енергією взаємодії має повну енергію

$$E = E_0 + E_1 + \dots + E_N.$$

Для системи з N бозонів при температурі $T = 0$ стан з найменшою енергією виходить, якщо всі бозони помістити в одночастковий стан з найнижчою енергією, тобто в так званий основний стан. З цього відразу випливає, що система N бозонів має набагато меншу енергію, ніж система N ферміонів.

Враховувати вказану важливу властивість ферміонів абсолютно необхідно, щоб зрозуміти, зокрема, поведінку електронів в кристалах, які є діелектриками, провідниками і напівпровідниками.

Інша важлива властивість ферміонів виходить навіть з зовнішнього вигляду функцій (10.12). Вона полягає в тому, що коли аргументи 1 і 2 функції ψ_a збігаються, вона переходить в 0. Таким чином, ймовірність знайти два ферміона близько один від одного дуже мала. Це можна розуміти як прагнення ферміонів як би відштовхнутися один одного, в той час як бозони прагнуть зібратися разом.

§11. Взаємодія електромагнітного випромінювання з атомною системою

У цьому розділі ми розглянемо взаємодію окремої атомної системи з електромагнітним полем. Тут ми коротко викладемо теорію спонтанних і індукованих переходів під дією електромагнітного поля.

Спочатку нагадаємо деякі відомості з курсу електродинаміки.

Рівняння Максвелла, що описують електромагнітне поле, яке розповсюджується, має вигляд

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \text{rot } \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \\ \text{div } \vec{D} = \rho, \\ \text{div } \vec{B} = 0, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (11.1 \text{ а}) \\ (11.1 \text{ б}) \\ (11.1 \text{ в}) \\ (11.1 \text{ г}) \end{array}$$

де $\vec{j}$ – густина об'ємного струму, $\vec{E}$ і $\vec{H}$ – напруженості електричного і магнітного полів відповідно, $\vec{D}$ і $\vec{B}$ – вектори індукції цих полів.

В однорідному ізотропному середовищі поля $\vec{B}$ і $\vec{D}$ пов'язані з полями $\vec{H}$ і $\vec{E}$ співвідношеннями

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \mu \vec{H}, \quad \vec{D} = \varepsilon \vec{E}, \\ \text{rot rot } \vec{E} &= -\mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \end{aligned} \quad (11.2)$$

На основі векторної тотожності $\text{rot rot } \vec{A} = -\nabla^2 \vec{A} + \text{grad div } \vec{A}$ і враховуючи умову $\text{div } \vec{E} = 0$, справедливу при $\rho = 0$, останнє рівняння можна записати у вигляді

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (11.3)$$

Рівняння (11.3) має важливий розв'язок

$$\vec{E} = E_0 e^{-i(\omega t - (\vec{k}\vec{r}))}, \quad (11.4)$$

де $k = \omega \sqrt{\mu \varepsilon}$, описує плоску хвилю, що поширюється вздовж напрямку довільного вектора $\vec{k}$ і має довжину

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (11.5)$$

і частоту коливань

$$v = \frac{\omega}{2\pi}. \quad (11.6)$$

Фазова швидкість цієї хвилі визначається співвідношенням

$$v_{\text{фаз.}} = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{\sqrt{\mu\varepsilon}} = \frac{c}{\sqrt{\left(\frac{\mu}{\mu_0}\right)\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right)}} = \frac{c}{n}, \quad (11.7)$$

в якому $n = \sqrt{\left(\frac{\mu}{\mu_0}\right)\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right)}$ – показник заломлення середовища, а $c = (\mu_0\varepsilon_0)^{-1/2}$ – швидкість світла у вакуумі.

Можна показати, що рівняння (11.1), з урахуванням рівності $\text{div } \vec{E} = 0$, дійсно задовольняються функцією (11.4), але за умови, що вектор $\vec{E}_0$ перпендикулярний вектору $\vec{k}$, уздовж якого поширюється плоска електромагнітна хвиля. Магнітне поле $\vec{H}$ хвилі розраховується за допомогою рівняння (11.1 б) і воно є пов'язаним з електромагнітним полем (11.4) співвідношенням

$$\vec{H} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} [\vec{e}_k \vec{E}_0] e^{i(\omega t - (\vec{k}\vec{r}))}, \quad (11.8)$$

де $\vec{e}_k$ – орт вектора $\vec{k}$.

У будь-якому курсі електродинаміки можна знайти прості розрахунки, які показують, що $\vec{E} \perp \vec{k}$, $\vec{H} \perp \vec{k}$ і $\vec{H} \perp \vec{E}$, так що в плоскій гармонічній електромагнітній хвилі вектори $\vec{E}$, $\vec{H}$ і $\vec{k}$ утворюють правоїгвинтову трійку взаємно перпендикулярних векторів.

Візьмемо тепер скалярне множення рівняння (11.1а) з $\vec{H}$, а рівняння (11.1 б) – з $\vec{E}$ і віднімемо друге рівняння з першого. Матимемо

$$(\vec{E} \text{rot} \vec{H}) - (\vec{H} \text{rot} \vec{E}) = \left(\vec{E} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \right) + \left(\vec{H} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon (\vec{E} \vec{E}) + \mu (\vec{H} \vec{H})].$$

Скористаємося виборною тотожністю

$$\text{div} [\vec{A} \vec{B}] = (\vec{B} \text{rot} \vec{A}) - (\vec{A} \text{rot} \vec{B})$$

і перетворимо ліву частину отриманого співвідношення. Прийдемо до рівняння

$$-\operatorname{div} [\vec{E} \vec{H}] = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon(\vec{E} \vec{E}) + \mu(\vec{H} \vec{H})] \quad (11.9)$$

Застосуємо до нього теорему Остроградського-Гаусса

$$\int_V \operatorname{div} \vec{A} d^3\vec{r} = \oint_S (\vec{A} \vec{n}) dS, \quad (11.10)$$

остаточно отримаємо рівняння

$$-\oint_S ([\vec{E} \vec{H}] \vec{n}) dS = \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\varepsilon}{2} (\vec{E} \vec{E}) + \frac{\mu}{2} (\vec{H} \vec{H}) \right] d^3\vec{r} \quad (11.11)$$

Величина $[\vec{E} \vec{H}]$ називається вектором Пойнтінга. Цей вектор характеризує величину потоку енергії електромагнітного поля через одиничну площадку і має напрямок потоку. Таким чином, інтеграл в (11.11) по поверхні S , взятий зі знаком мінус, дорівнює повному потоку енергії, що вливається в об'єм V .

В силу закону збереження енергії для середовища без енергетичних втрат величина інтегрального потоку енергії, яка притікає повинна дорівнювати швидкості збільшення збереженої енергії. Таким чином, повна електромагнітна енергія, яка запасена в об'ємі V , повинна визначатися формулою

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \int_V [\varepsilon(\vec{E} \vec{E}) + \mu(\vec{H} \vec{H})] d^3\vec{r} \quad (11.12)$$

Квантування мод електромагнітного поля

Розглянемо моди електромагнітного поля простого плоского резонатора. (Під модами поля розуміють його частоти). Усередині резонатора, що має дві паралельні стінки, які є ідеальними провідниками, є електромагнітне поле, що заповнює весь простір між стінками. Нехай електричне поле якоїсь моди направлено паралельно осі Y . Оскільки величина повинна дорівнювати нулю на стінках резонатора, які є абсолютними провідниками, тобто при $z = 0$ і при $z = 1$ (див. рис.), візьмемо електричне поле електромагнітної моди у вигляді

$$\vec{E}_l = \vec{j} \sqrt{\frac{2}{V\varepsilon}} p_l(t) \sin k_l z, \quad (11.13)$$

де V – повний об’єм резонатора, або об’єм, зайнятий модою, $\vec{j}$ – одиничний вектор у напрямку осі Y . Моду виду (11.13) можна вважати суперпозицією двох бігучих плоских хвиль виду (11.4). Щоб поле дійсно переходило в нуль на стінках, має виконуватися рівність $k_l = \frac{l\pi}{L}$, де l – деяке ціле число. Воно дорівнює цілому числу півхвиль, що укладаються на довжині L резонатора. Магнітне поле $\vec{H}$ розглянутої електромагнітної моди має бути максимальним на стінках резонатора і перпендикулярним електричному полю $\vec{E}$. Для нього можна використовувати вираз

$$\vec{H}_l = \vec{i} \omega_l \sqrt{2/V\mu} q_l \cos k_l z, \quad (11.14)$$

де $\vec{i}$ – одиничний вектор в напрямку осі X і $\omega_l = k_l(\mu\varepsilon)^{-1/2}$.

Якщо підставити (11.13) і (11.14) в рівняння (11.1 а), то отримаємо рівняння

$$p_l = \frac{dq_l}{dt}. \quad (11.15)$$

Підстановка в рівняння (11.1 б) дає рівняння

$$\omega_l^2 q_l = -\frac{dp_l}{dt} \quad (11.16)$$

Комбінуючи рівняння (11.15) і (11.16), приходимо до рівнянь

$$\omega_l^2 q_l = -\ddot{q}_l$$

$$\omega_l^2 p_l = -\ddot{p}_l$$

Загальний розв’язок рівняння для q_l має вигляд

$$q_l(t) = q_l(0) \cos \omega_l t + \frac{\dot{q}_l(0)}{\omega_l} \sin \omega_l t \quad (11.17)$$

Використовуючи (11.13) і (11.14) і формулу (11.12), для енергії моди отримуємо

$$\varepsilon_l = \frac{1}{2} \int_V [\varepsilon(\vec{E}_l \vec{E}_l) + \mu(\vec{H}_l \vec{H}_l)] d^3\vec{r} = \frac{1}{2} [p_l^2(t) + \omega_l^2 q_l^2(t)]. \quad (11.18)$$

Порівняємо цей вираз з виразом (4.1) для гамільтоніана гармонічного осцилятора:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\omega^2 m \hat{x}^2, \quad (11.19)$$

де $\omega^2 = \frac{K}{m}$, а $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$.

Як ми бачимо, класичний гамільтоніан електромагнітної моди (11.18) збігається з квантовим гамільтоніаном (11.19), якщо зробити в (11.18) заміну $\hat{p}_l \rightarrow \hat{p}$ і $\hat{q}_l \rightarrow \hat{x}$ і покласти $m = 1$.

Квантування електромагнітної моди можна, таким чином, здійснити, розглядаючи формально моду як гармонічний осцилятор і вважаючи $\hat{p}_l$ і $\hat{q}_l$ парою сполучених операторів імпульсу і координати, які задовольняють, подібно операторам $\hat{p}$ і $\hat{x}$ точкової частинки, перестановочним співвідношенням

$$[\hat{p}_l, \hat{p}_m] = [\hat{q}_l, \hat{q}_m] = 0 \quad (11.20)$$

$$[\hat{q}_l, \hat{p}_m] = i\hbar\delta_{lm}. \quad (11.21)$$

Формальна аналогія величин $\hat{p}_l$ і $\hat{q}_l$ з величинами $\hat{p}$ і $\hat{x}$ заснована не тільки на схожості гамільтоніанів (11.18) і (11.19). Рівняння руху, яким задовольняють обидві пари сполучених величин, теж абсолютно однакові. Рівняння Гамільтона для величин $\hat{p}_x$ і $\hat{x}$ з урахуванням (11.19) має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}}{dt} &= -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} = -\omega^2 m \hat{x}, \\ \frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} = \frac{\hat{p}}{m} \end{aligned} \quad (11.22)$$

Рівняння Гамільтона для величин $\hat{p}_l$ і $\hat{q}_l$ з урахуванням (11.18) має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}_l}{dt} &= -\frac{\partial \hat{H}_l}{\partial \hat{q}_l} = -\omega_l^2 \hat{q}_l, \\ \frac{d\hat{q}_l}{dt} &= \frac{\partial \hat{H}_l}{\partial \hat{p}_l} = \hat{p}_l. \end{aligned} \quad (11.23)$$

Вони збігаються з рівняннями (11.15) і (11.16), які ми вивели вище з рівнянь Максвелла.

Електромагнітні оператори народження і знищення

Так само, як для гармонічного осцилятора (див. §5) корисно ввести оператор знищення $\hat{a}_l$ і оператор народження $\hat{a}_l^+$, які для електромагнітної моди, визначаються формулами

$$\begin{aligned}\hat{a}_l &= \left(\frac{1}{2\hbar\omega_l}\right)^{\frac{1}{2}} (\omega_l \hat{q}_l + i\hat{p}_l), \\ \hat{a}_l^+ &= \left(\frac{1}{2\hbar\omega_l}\right)^{\frac{1}{2}} (\omega_l \hat{q}_l - i\hat{p}_l).\end{aligned}\quad (11.24)$$

або зворотними формулами

$$\begin{aligned}\hat{p}_l &= i \left(\frac{\hbar\omega_l}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (\hat{a}_l^+ - \hat{a}_l), \\ \hat{q}_l &= \left(\frac{\hbar}{2\omega_l}\right)^{\frac{1}{2}} (\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l).\end{aligned}\quad (11.25)$$

На відміну від операторів $\hat{p}_l$ і $\hat{q}_l$ оператори $\hat{a}_l$ і $\hat{a}_l^+$ не ермітові, але вони ермітово пов'язані один з одним.

Підставляючи вирази (11.25) в формули (11.13) і (11.14) для полів $\vec{E}_l$ і $\vec{H}_l$ приходимо до формул

$$\begin{aligned}\hat{E}_{ly} &= i \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{V\varepsilon}} (\hat{a}_l^+ - \hat{a}_l) \sin k_l z, \\ \hat{H}_{lx} &= \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{V\mu}} (\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l) \cos k_l z.\end{aligned}\quad (11.26)$$

Як бачимо, електричне і магнітне поля електромагнітної моди описуються квантово-механічними операторами.

Використовуючи перестановки співвідношення (11.20) і (11.21) і формули (11.24), виведемо перестановки співвідношення для операторів знищення і народження:

$$\begin{aligned}[\hat{a}_l, \hat{a}_m] &= [\hat{a}_l^+, \hat{a}_m^+] = 0, \\ [\hat{a}_l, \hat{a}_m^+] &= \delta_{lm}.\end{aligned}\quad (11.27)$$

Модовий гамільтоніан (11.18) можна записати через оператори $\hat{a}_l^+$ і $\hat{a}_l$:

$$\hat{H}_l = \frac{1}{2}(\hat{p}_l^2 + \omega_l^2 \hat{q}_l^2) = \frac{1}{2} \left(-\frac{\hbar\omega_l}{2}(\hat{a}_l^+ - \hat{a}_l)(\hat{a}_l^+ - \hat{a}_l) + \frac{\hbar\omega_l}{2}(\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l)(\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l) \right) = \frac{\hbar\omega_l}{2}(\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l)(\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l).$$

Використовуючи останнє перестановочне співвідношення з (11.27), замінимо $\hat{a}_l \hat{a}_l^+ = 1 + \hat{a}_l^+ \hat{a}_l$, в результаті отримаємо

$$\hat{H}_l = \hbar\omega_l \left(\hat{a}_l^+ \hat{a}_l + \frac{1}{2} \right). \quad (11.28)$$

Формальна аналогія між електромагнітною модою і гармонічним осцилятором дозволяє побудувати для неї власні функції $|n_l\rangle$, які, як і їх аналоги U_n у §5 задовольняють наступним рівняннями:

$$\begin{aligned} \hat{a}_l^+ |n_l\rangle &= (n_l + 1)^{\frac{1}{2}} |n_l + 1\rangle, \\ \hat{a}_l |n_l\rangle &= (n_l)^{\frac{1}{2}} |n_l - 1\rangle. \end{aligned} \quad (11.29)$$

Таким чином, рівняння на власні числа і власні функції енергії електромагнітної хвилі набуває вигляду:

$$\hat{H}_l |n_l\rangle = \hbar\omega_l \left(\hat{a}_l^+ \hat{a}_l + \frac{1}{2} \right) |n_l\rangle = \hbar\omega_l \left(n_l + \frac{1}{2} \right) |n_l\rangle \quad (11.30)$$

Отже, енергія електромагнітної моди може приймати тільки значення з набору чисел

$$E_{n_l} = \hbar\omega_l \left(n_l + \frac{1}{2} \right), \quad (11.31)$$

тобто енергія електромагнітної моди квантується.

Квантування енергії електромагнітних мод було постульовано Планком у 1900 році. На підставі формули (11.31), відкидаючи так звану енергію нульових коливань для будь-якої моди ($n = 0, E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, тобто енергію основного стану), легко отримати формулу для середньої енергії

$$E_{cp} = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \quad (11.32)$$

яка при $kT \gg \hbar\omega$ дає наближений результат $E_{cp} = kT$, добре відомий з класичної статистичної фізики. Формула (11.32) (розподіл Планка) дозволила знайти вихід з «ультрафіолетової катастрофи».

Індуковані переходи атомної системи в режимі зіткнень

Коли на атомну систему, що знаходиться в збудженому стані, діє електромагнітне збурення, в ній мають місце переходи в нижче - і вище розташовані енергетичні стани, причому швидкість переходів прямо пропорційна густині енергії падаючого електромагнітного поля. Будемо розраховувати цю швидкість, користуючись напівкласичною теорією, згідно з якою збуджені атоми розглядаються квантовомеханічно, а електромагнітне поле – класично.

Нехай атомна система в момент $t = 0$ перебувала в стані 2 і нехай її нижче розташований по енергії стан 1 відокремлено від стану 2 енергетичним інтервалом $E_2 - E_1 = \hbar\omega_{21}$, як показано на рис.11.1

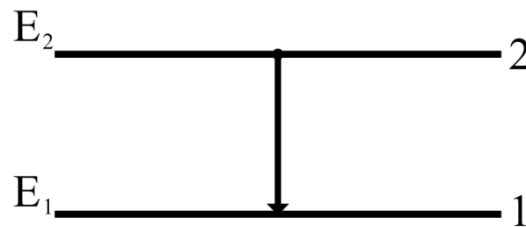


Рис.11.1

(Інші енергетичні рівні на цьому рисунку не показано).

Нехай електричне поле, яке падає на середу електромагнітного випромінювання в точці $\vec{r}$, в якій розташована атомна система, дається формулою

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r}) \cos \omega t. \quad (11.33)$$

Так як потенціальна енергія електрона в електричному полі $\vec{E}$ визначається формулою

$$V = -e(\vec{E}\vec{r}), \quad (11.34)$$

для гамільтоніана взаємодії атомної системи з полем маємо такий вираз:

$$\hat{H}'(t) = -\frac{eE_0 y}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (11.35)$$

тут ми припустимо, що поле поляризовано в напрямку осі у. Як бачимо, гамільтоніан взаємодії (11.35) має стандартний вид (8.1). Тому можна безпосередньо скористатися формулою (8.7) для швидкості переходів вниз

($2 \rightarrow 1$) або вгору ($1 \rightarrow 2$). (Використання цієї формули допустимо лише в тих випадках, коли атомна система відчуває багато зіткнень з іншими атомами, перш ніж в ній відбудеться хоча б один індукований перехід. Така ситуація має місце в слабких електромагнітних полях).

$$W_{1 \rightarrow 2} = W_{2 \rightarrow 1} \equiv W_{\text{инд.}} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{12}|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) = \frac{\pi e^2 E_0^2}{2\hbar} |y_{12}|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega), \quad (11.36)$$

причому тут

$$e y_{12} \equiv e \int U_1^* y U_2 d\vec{r} \quad (11.37)$$

Коли різниця енергій $E_2 - E_1$ точно невідома, слід користуватися функцією форми лінії $g(E)$, яка визначається співвідношенням

$$g(E) dE = \text{ймовірності знайти значення } E_2 - E_1, \\ \text{укладене між } E \text{ і } E + dE, \quad (11.38)$$

при цьому, очевидно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(E) dE = 1.$$

Тоді формула для швидкості $W_{\text{инд.}}$ індукованих електромагнітним полем переходів виходить інтегруванням формули (11.36) по всіх можливих значеннях $E_2 - E_1$ з ваговою функцією $g(E_2 - E_1)$:

$$W_{\text{инд.}} = \frac{\pi e^2 E_0^2 |y_{12}|^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) g(E_2 - E_1) d(E_2 - E_1) = \\ = \frac{\pi e^2 E_0^2 |y_{12}|^2}{2\pi} g(\hbar\omega).$$

У цій формулі можна перейти від функції $g(E)$ до аналогічної функції $g(\nu)$, використовуючи визначальне останню функцію співвідношення $g(\nu) d\nu = g(E) d(h\nu)$ (закон збереження ймовірності). Тоді прийдемо до формули

$$W_{\text{инд.}} = \frac{e^2 E_0^2 |y_{12}|^2}{4\hbar^2} g(\nu) \quad (11.39)$$

Зазвичай електромагнітне поле характеризують не величиною E_0^2 , а інтенсивністю I_ν , яка представляє собою фактично вектор Пойнтінга

$$I_\nu = S = w \cdot V,$$

де w – об’ємна густина енергії на частоті ν , а $V = \frac{c}{n}$ – швидкість поширення електромагнітної хвилі в середовищі з показником заломлення n

$$I_\nu = \frac{cn\varepsilon_0 E_0^2}{2} \quad (11.40)$$

Тому формулу (11.39) можна остаточно представити у вигляді

$$W_{\text{инд.}} = \frac{e^2 |y_{12}|^2}{2\hbar^2 cn\varepsilon_0} g(\nu) I_\nu \quad (11.41)$$

Якщо $y_{12} = 0$, це буває, коли функції U_1 і U_2 , які входять в (11.37), мають однакову парність, швидкість $W_{\text{инд.}}$ індукованих переходів переходить в нуль. Такі неможливі переходи називаються дипольне забороненими.

Пояснимо залежність $W_{\text{инд.}}$ від $g(\nu)$. У реальних атомних системах завжди існує механізм, який робить власні числа енергії, а тому і різницю $E_2 - E_1$, невизначеними, так що ця різниця насправді не має точного значення. Один з найбільш поширених механізмів пов’язаний з тим, що зіткнення з іншими атомами або спонтанні переходи в розташовані нижче стани можуть змінювати час життя атома, що знаходиться на рівні 1 або 2. Згідно співвідношенню невизначеностей, це призводить до розмазування різниці $E_2 - E_1$ на інтервал

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\tau}, \quad (11.42)$$

де τ – час життя атомної системи.

Таким чином, для ізольованих атомів енергетична ширина ΔE функції форми спектральної лінії $g(E)$ визначається формулою (11.42).

Спонтанні електромагнітні переходи

У 1916 р. Ейнштейн прийшов до висновку про існування так званих спонтанних переходів, тобто переходів на розташовані нижче рівні при відсутності зовнішнього електромагнітного випромінювання. Ясно, що швидкість таких переходів не залежить від інтенсивності I_ν зовнішнього поля. Його міркування виглядали наступним чином.

Уявімо собі велику систему, що складається з ідентичних атомів, або ансамбль атомів; система знаходиться в тепловій рівновазі з тепловим електромагнітним випромінюванням абсолютно чорного тіла (як кажуть чорним випромінюванням) при деякій температурі T . Середні числа атомів, що займають деякі рівні 2 і 1, тобто два власних стани атома (будемо надалі називати їх населеностями) повинні відповідати формулі Больцмана. Припускаючи, що квантові народження рівнів однаково, тобто $g_2 = g_1$ з формули отримуємо

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}}. \quad (11.43)$$

Якщо $E_2 > E_1$, то $N_2 < N_1$. З іншого боку, повне число атомів, що здійснюють переходи $2 \rightarrow 1$ за даний проміжок часу, при тепловій рівновазі має дорівнювати числу атомів, що здійснюють зворотні переходи $1 \rightarrow 2$. Це випливає з того, що числа N_2 і N_1 не повинні змінюватися з часом.

Зазначена розумна вимога не буде суперечити нерівності $N_2 < N_1$ тільки в тому випадку, якщо допустити, що швидкість переходів окремого атома вниз ($2 \rightarrow 1$) більше швидкості його переходів вгору ($1 \rightarrow 2$). Тому Ейнштейн постулював такі формули для швидкості переходів

$$\begin{aligned} W_{2 \rightarrow 1} &= B\rho(\nu) + A, \\ W_{1 \rightarrow 2} &= B\rho(\nu). \end{aligned} \quad (11.44)$$

Згідно з цими формулами, швидкість переходів вниз дорівнює сумі швидкості індукованих переходів $B\rho(\nu)$ (яка пропорційна площині електромагнітного випромінювання $\rho(\nu)$) і швидкості спонтанних переходів A . Швидкість переходів вгору дорівнює лише швидкості індукованих переходів $B\rho(\nu)$. Прирівнюючи числа атомів, що здійснюють переходи вгору і вниз в даний проміжок часу, приходимо до співвідношення

$$N_2[B\rho(\nu) + A] = N_1 B\rho(\nu), \quad (11.45)$$

так що

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B\rho(\nu)}{B\rho(\nu) + A} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}} = e^{-\frac{h\nu}{kT}}. \quad (11.46)$$

Формула (11.46) повинна бути в згоді з формулою Планка для спектральної густини енергії теплового електромагнітного випромінювання, що має вигляд

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi n^3 h \nu^3}{c^3 \left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)}. \quad (11.47)$$

Зіставляючи (11.46) і (11.47), відразу отримуємо знамените співвідношення Ейнштейна

$$\frac{A}{B} = \frac{8\pi n^3 h \nu^3}{c^3}, \quad (11.48)$$

де A і B називають ейнштейнівськими коефіцієнтами.

Припустимо, що якимось чином в початковий момент вдалося перевести значну кількість атомів в збуджений стан, хоча в нормальних умовах, тобто при тепловій рівновазі, населеність рівня 2 мала. Якщо відсутнє зовнішнє електромагнітне випромінювання ($\rho(\nu) = 0$), то, згідно з (11.44), середнє число атомів, що здійснюють перехід $2 \rightarrow 1$ в одиницю часу, так само $N_2 A$. Таким чином, середня населеність рівня 2 повинна спадати по закону

$$\frac{dN_2}{dt} = -N_2 A.$$

Тому

$$N_2(t) = N_2(0)e^{-At} = N_2(0)e^{-t/t_{\text{спонт.}}}$$

Таким чином, коефіцієнт Ейнштейна A дорівнює зворотному часу життя $t_{\text{спонт.}}$ збудженого атома щодо спонтанного переходу.

На закінчення наведемо строгий квантово-механічний висновок формули для швидкості спонтанних переходів.

Припустимо, що атом ефективно взаємодіє тільки з однією модою електромагнітного поля. Формулу для швидкості переходів під дією однієї електромагнітної моди необхідно підсумувати, як ми побачимо надалі, за всіма модам; тоді ми знайдемо повну швидкість спонтанних переходів зі стану $|2\rangle$ в стан $|1\rangle$.

Отже, наш розрахунок починаємо з припущення, що повна квантово-механічна система складається з одного атома і однієї моди l електромагнітного випромінювання, як показано на рисунку 11.2.

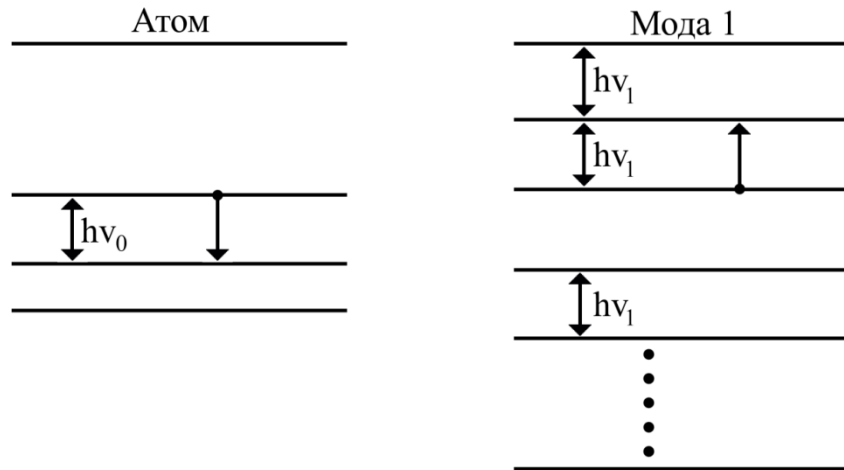


Рис.11.2

До переходу атом знаходився в стані $|2\rangle$, а мода l електромагнітного випромінювання – в стані $|n_l\rangle$. Початковий стан повної системи позначимо символом

$$|2, n_l\rangle = |2\rangle|n_l\rangle. \quad (11.49)$$

Після переходу атом виявляється в стані $|1\rangle$, а мода l придбає квант випромінювання і переходить в стан $|n_l + 1\rangle$. Таким чином, кінцевий стан повної системи потрібно позначити символом

$$|1, n_l + 1\rangle = |1\rangle|n_l + 1\rangle. \quad (11.50)$$

Енергії початкового і кінцевого станів визначаються виразами

$$E_i = E_2 + \hbar\omega_l \left(n_l + \frac{1}{2}\right),$$

$$E_f = E_1 + \hbar\omega_l \left(n_l + \frac{3}{2}\right),$$

так що

$$E_i - E_f = E_2 - E_1 - \hbar\omega_l. \quad (11.51)$$

Гамільтоніан взаємодії атома з електромагнітною модою визначається формулою (11.34):

$$\hat{H}' = -eE_{ly}(z, t)y, \quad (11.52)$$

в якій передбачається, що мода електромагнітного поля лінійно поляризована вздовж осі y і що вона поширюється уздовж осі z .

Для електричної частини плоскої біжучої електромагнітної хвилі моди l має місце вираз

$$\vec{E}_{\vec{k}\lambda}(\vec{r}, t) = i\vec{e}_{\vec{k}\lambda}\sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{2V\varepsilon}}\left[a_{\vec{k}\lambda}^+(t)e^{-i(\vec{k}\vec{r})} - a_{\vec{k}\lambda}(t)e^{i(\vec{k}\vec{r})}\right], \quad (11.53)$$

де вектор $\vec{k}$ характеризує напрямок поширення хвилі, а вектор $\vec{e}_{\vec{k}\lambda}$, орт, перпендикулярний вектору $\vec{k}$, – напрямок електричного поля. Два напрямки поляризації, можливі для даного вектора $\vec{k}$, позначені індексом λ ($\lambda = 1, 2$).

Стосовно до (11.52) (11.53) дає

$$\hat{H}' = -ie\sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{V\varepsilon}}\left(\hat{a}_l^+e^{-i(\vec{k}\vec{r})} - \hat{a}_le^{i(\vec{k}\vec{r})}\right)y \quad (11.54)$$

Оскільки повна квантово-механічна система включає в себе також і поле електромагнітної моди, гамільтоніан $\hat{H}'$ тепер явно не залежить від часу.

Швидкість переходів можна обчислити за формулою (8.8)

$$W^{(l)} = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_l}{\hbar 2V\varepsilon} \left| \langle 1, n_l + 1 | \left(\left(\hat{a}_l^+ e^{-i(\vec{k}\vec{r})} \right) - \left(\hat{a}_l e^{i(\vec{k}\vec{r})} \right) \right) y | 2, n_l \rangle \right| \times \\ \times \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega_l) \quad (11.55)$$

Щоб перетворити формулу (11.55), необхідно скористатися співвідношеннями

$$\begin{aligned} \langle n_l + 1 | \hat{a}_l^+ | n_l \rangle &= \sqrt{n_l + 1}, \\ \langle n_l + 1 | \hat{a}_l | n_l \rangle &= 0, \\ \langle 1 | y | 2 \rangle &= y_{12}. \end{aligned} \quad (11.56)$$

Тоді з (11.55) отримаємо

$$W^{(l)} = \frac{2\pi e^2 \omega_l}{V\varepsilon} |y_{12}|^2 (n_l + 1) \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega_l), \quad (11.57)$$

де верхній індекс вказує, що даний перехід виникає за рахунок взаємодії атома з електромагнітною модою l .

Зазвичай величину $W^{(l)}$ розбивають на два доданки:

$$W^{(l)} = W_{\text{инд.}}^{(l)} = W_{\text{спонт.}}^{(l)}$$

Перший доданок

$$W_{\text{инд.}}^{(l)} = \frac{2\pi e^2 \omega_l}{V\varepsilon} |y_{12}|^2 n_l \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega_l) \quad (11.58)$$

дає швидкість індукованих переходів, тому що воно пропорційно густині енергії $\frac{n_l \hbar \omega_l}{V}$ моди l електромагнітного випромінювання. Другий доданок

$$W_{\text{спонт.}}^{(l)} = \frac{2\pi e^2 \omega_l}{V\varepsilon} |y_{12}|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega_l) \quad (11.59)$$

дає швидкість спонтанних переходів, так як воно не залежить від енергії електромагнітної моди.

Зауважимо, що

$$\frac{W_{\text{инд.}}^{(l)}}{W_{\text{спонт.}}^{(l)}} = n_l, \quad (11.60)$$

тобто відношення швидкості індукованих переходів швидкості спонтанних переходів (обидві швидкості для моди l) дорівнює n_l – числу квантів (фотонів) розглянутої моди.

При $n_l = 0$, тобто коли мода знаходиться в основному стані,

$$W^{(l)} = W_{\text{спонт.}}^{(l)}$$

Щоб знайти повну швидкість спонтанних переходів, потрібно підсумувати формулу (11.59) по всім модам. Число мод, що припадають на одиничний інтервал частоти в ящику об'ємом V , дається відомим виразом

$$\rho(\nu_l) = \frac{8\pi \nu_l^2 n^3 V}{c^3}.$$

Отже, повна швидкість спонтанних переходів дорівнює

$$W_{\text{спонт.}} = \int_0^\infty W_{\text{спонт.}}^{(l)} \rho(\nu_l) d\nu_l = \frac{16\pi^2 n^3 e^2 |y_{12}|^2 \nu_0^3}{\varepsilon \hbar c^3} \quad (11.61)$$

При виведенні формули (11.61) ми скористалися співвідношенням $E_2 - E_1 = \hbar\nu_0$. Щоб отримати більш точний вираз, слід, звичайно, врахувати різні напрямки поляризації електричного поля різних електромагнітних мод. Тому матричний елемент $|y_{12}|^2$ в (11.61) треба замінити виразом

$$|y_{12}|^2 \rightarrow \frac{1}{3} (|x_{12}|^2 + |y_{12}|^2 + |z_{12}|^2).$$

Тоді остаточна формула для швидкості спонтанних переходів набирає вигляду

$$W_{\text{спонт.}} = \frac{1}{t_{\text{спонт.}}} = \frac{16\pi^2 n^3 e^2 v_0^3}{3\epsilon \hbar c^3} (|x_{12}|^2 + |y_{12}|^2 + |z_{12}|^2). \quad (11.62)$$

РОЗДІЛ III. ДЕЯКІ ПИТАННЯ КВАНТОВОЇ ЕЛЕКТРОНІКИ ТА КВАНТОВОЇ МАКРОФІЗИКИ

§ 12 Рівняння руху зарядженої мікрочастинки у довільному електромагнітному полі

У всіх питаннях, що розглянуті вище, оператор Гамільтона є оператором повної енергії. Це твердження має місце завжди, коли сили, що діють на частинку, є стаціонарними і не залежать від її швидкості. В загальному випадку оператор Гамільтона не співпадає з оператором повної енергії, а має більш широкий зміст. Дійсно, у класичній фізиці нестационарним силам, не залежним від швидкості, відповідає функція Гамільтона, що є сумою кінетичної енергії та так званої силової функції $U(x, y, z, t)$. Оскільки $U(\vec{r}, t)$ не є в цьому разі потенціальною енергією, то і в квантовій механіці треба розглянути оператор Гамільтона, який, взагалі кажучи, не є оператором повної енергії:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(x, y, z, t) \quad (12.1)$$

де $\hat{T}$ – оператор кінетичної енергії, $\hat{U}(\vec{r}, t) = U(\vec{r}, t)$ – силова функція.

Зауважимо, що до такої ситуації ми зверталися, коли розглядали рівняння Шредінгера для частинки, що рухається в полі нестационарної сили.

При русі зарядженої частинки в електромагнітному полі ми маємо саме випадок залежності сил від швидкості частинки – такими силами є сили Лоренца. Спираючись на евристичний принцип аналогії з класичною механікою, ми одержимо гамільтоніан, якщо покладемо

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \hat{\vec{A}} \right)^2 - e\varphi, \quad (12.2)$$

де e – заряд частинки, $\hat{\vec{A}}$ – векторний і φ – скалярний потенціали зовнішнього електромагнітного поля; оператор $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$.

Обрана форма гамільтоніана (12.2) відповідає вимозі калібрувальної інваріантності і підтверджується на досліді. Коли крім електромагнітних сил діють ще сили іншої природи з силовою функцією U , то

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \hat{\vec{A}} \right)^2 - e\varphi + U \quad (12.3)$$

Перепишемо оператор $\hat{H}$ в розгорненому вигляді. Для цього зауважимо, що

$$\left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x \right)^2 = p_x^2 + \frac{e}{c} \hat{p}_x \hat{A}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x \hat{p}_x + \frac{e^2}{c^2} \hat{A}_x^2.$$

Приймаючи до уваги переставні співвідношення

$$\hat{F} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{F} = i\hbar \frac{\partial \hat{F}}{\partial x},$$

де $\hat{F} = \hat{F}(x, y, z)$,

одержимо

$$\left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x \right)^2 = p_x^2 + \frac{2e}{c} \hat{A}_x \hat{p}_x - \frac{i\hbar e}{c} \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial x} + \frac{e^2}{c^2} \hat{A}_x^2,$$

або у векторній формі

$$\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \hat{\vec{A}} \right)^2 = \hat{\vec{p}}^2 + \frac{2e}{c} (\hat{\vec{A}} \hat{\vec{p}}) - \frac{i\hbar e}{c} \text{div} \hat{\vec{A}} + \frac{e^2}{c^2} \hat{\vec{A}}^2.$$

Отже

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\vec{p}}^2 + \frac{2}{mc} (\hat{\vec{A}} \hat{\vec{p}}) - \frac{i\hbar e}{2mc} \text{div} \hat{\vec{A}} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\vec{A}}^2 - e\varphi + U \quad (12.4)$$

Встановлення рівнянь руху, як відомо, зводиться до обчислення квантових дужок Пуассона для операторів $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ та $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ з гамільтоніаном $\hat{H}$.

Обчислимо спочатку оператор $\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{dx}{dt}$ (бо $\hat{x} = x$):

$$\frac{dx}{dt} = [\hat{H}, x] = \frac{1}{2m} [\hat{\vec{p}}^2, x] + \frac{e}{mc} [(\hat{\vec{A}} \hat{\vec{p}}), x].$$

Легко отримати, що перша дужка у правому боці дорівнює $2\hat{p}_x$, а для другої одержимо

$$\begin{aligned} [(\hat{\vec{A}} \hat{\vec{p}}), x] &= [\hat{A}_x \hat{p}_x, x] = \frac{1}{i\hbar} (x \hat{A}_x p_x - \hat{A}_x p_x x) = \\ &= \frac{1}{i\hbar} (x \hat{A}_x p_x - A_x (x p_x - i\hbar)) = \hat{A}_x \end{aligned}$$

Отже

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} \left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x \right) \quad (12.5)$$

Аналогічні формули ми одержимо для $\frac{dy}{dt}$ та $\frac{dz}{dt}$ у повній формальній аналогії з першою групою класичних рівнянь Гамільтона. Розглянемо тепер похідну

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = [\hat{H}, \hat{p}_x] = \frac{e}{mc} \left[\left(\hat{\vec{A}} \hat{\vec{p}} \right), \hat{p}_x \right] - \frac{i\hbar e}{2mc} \left[\text{div} \hat{\vec{A}}, \hat{p}_x \right] + \frac{e^2}{2mc^2} \left[\hat{\vec{A}}^2, \hat{p}_x \right] - [e\varphi - U, \hat{p}_x].$$

і вичислимо окремі члени цього виразу:

$$\begin{aligned} -[e\varphi - U, \hat{p}_x] &= e \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x}, \\ \frac{e^2}{2mc^2} \left[\hat{\vec{A}}^2, \hat{p}_x \right] &= -\frac{e^2}{mc^2} \left(\hat{A}_x \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial x} + \hat{A}_y \frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x} + \hat{A}_z \frac{\partial \hat{A}_z}{\partial x} \right), \\ -\frac{i\hbar e}{2mc} \left[\text{div} \hat{\vec{A}}, \hat{p}_x \right] &= \frac{i\hbar e}{2mc} \left(\frac{\partial^2 \hat{A}_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{A}_y}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 \hat{A}_z}{\partial z \partial x} \right), \\ \frac{e}{mc} \left[\left(\hat{\vec{A}} \hat{\vec{p}} \right), \hat{p}_x \right] &= -\frac{e}{mc} \left(\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial x} \hat{p}_x + \frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x} \hat{p}_y + \frac{\partial \hat{A}_z}{\partial x} \hat{p}_z \right). \end{aligned}$$

Отже,

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}_x}{dt} &= -\frac{\partial U}{\partial x} + e \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{e}{mc} \left\{ \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial x} \left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x \right) + \frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x} \left(\hat{p}_y + \frac{e}{c} \hat{A}_y \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial \hat{A}_z}{\partial x} \left(\hat{p}_z + \frac{e}{c} \hat{A}_z \right) \right\} + \frac{i\hbar e}{2mc} \frac{\partial}{\partial x} \text{div} \hat{\vec{A}}. \end{aligned} \quad (12.6)$$

Щоб отримати похідну не від узагальненого імпульсу, а від кількості руху, рівної

$$m \frac{dx}{dt} = \hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x,$$

треба до (12.6) додати вираз

$$\frac{e}{c} \frac{d\hat{A}_x}{dt} = \frac{e}{c} \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial t} + \frac{e}{c} [\hat{H}, \hat{A}_x] = \frac{e}{c} \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial t} + \frac{e}{2mc} [\hat{\vec{p}}^2, \hat{A}_x] + \frac{e^2}{mc^2} \left[\left(\hat{\vec{A}} \hat{\vec{p}} \right), \hat{A}_x \right].$$

Обчисливши дужки Пуассона:

$$[\hat{\vec{p}}^2, \hat{A}_x] = 2 \left(\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial x} \hat{p}_x + \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y} \hat{p}_y + \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial z} \hat{p}_z \right) - i\hbar \Delta \hat{A}_x,$$

$$\left[\left(\hat{\vec{A}} \hat{\vec{p}} \right), \hat{A}_x \right] = \hat{A}_x \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial x} + \hat{A}_y \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y} + \hat{A}_z \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial z},$$

одержимо

$$\begin{aligned} \frac{e}{c} \frac{d\hat{A}_x}{dt} &= \frac{e}{c} \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial t} + \frac{e}{mc} \left\{ \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial x} \left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x \right) + \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y} \left(\hat{p}_y + \frac{e}{c} \hat{A}_y \right) + \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial z} \left(\hat{p}_z + \frac{e}{c} \hat{A}_z \right) \right\} - \\ &\quad \frac{i\hbar e}{2mc} \Delta \hat{A}_x. \end{aligned}$$

Додаючи це до (12.6) маємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x \right) &= -\frac{\partial U}{\partial x} + e \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \frac{e}{mc} \left(\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x} - \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y} \right) \left(\hat{p}_y + \frac{e}{c} \hat{A}_y \right) + \\ &\frac{e}{mc} \left(\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial z} - \frac{\partial \hat{A}_z}{\partial x} \right) \left(\hat{p}_z + \frac{e}{c} \hat{A}_z \right) - \frac{i\hbar e}{2mc} \left(\Delta \hat{A}_x - \frac{\partial}{\partial x} \operatorname{div} \hat{\vec{A}} \right), \end{aligned}$$

але, в зв'язку з тим, що

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial t} - \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \hat{E}_x,$$

$$\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x} - \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y} = \hat{\mathcal{H}}_z,$$

$$\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial z} - \frac{\partial \hat{A}_z}{\partial x} = \hat{\mathcal{H}}_y,$$

$$\Delta \hat{A}_x - \frac{\partial}{\partial x} \operatorname{div} \hat{\vec{A}} = -\operatorname{rot}_x \hat{\vec{\mathcal{H}}}$$

($\vec{E}$ та $\vec{\mathcal{H}}$ - вектори напруженості електричного і магнітного полів), одержимо остаточно вираз

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{A}_x \right) = -\frac{\partial U}{\partial x} - e \hat{E}_x - \frac{e}{c} \left\{ \hat{\mathcal{H}}_z \frac{\partial y}{\partial t} - \hat{\mathcal{H}}_y \frac{\partial z}{\partial t} \right\} + \frac{i\hbar e}{2mc} \operatorname{rot}_x \hat{\vec{\mathcal{H}}} \quad (12.7)$$

У випадку неоднорідного магнітного поля оператори похідних від координат не комутують з $\hat{\vec{\mathcal{H}}}$ і зручно зробити симетризацію виразу (12.7).

Оскільки

$$\hat{\mathcal{H}}_z \frac{dy}{dt} = \frac{1}{m} \hat{\mathcal{H}}_z \left(\hat{p}_y + \frac{e}{c} \hat{A}_y \right) = \frac{1}{m} \left(\hat{p}_y + \frac{e}{c} \hat{A}_y \right) \hat{\mathcal{H}}_z + \frac{i\hbar}{m} \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}_z}{\partial y},$$

$$\hat{\mathcal{H}}_y \frac{dz}{dt} = \frac{1}{m} \hat{\mathcal{H}}_y \left(\hat{p}_z + \frac{e}{c} \hat{A}_z \right) = \frac{1}{m} \left(\hat{p}_z + \frac{e}{c} \hat{A}_z \right) \hat{\mathcal{H}}_y + \frac{i\hbar}{m} \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}_y}{\partial z},$$

то

$$\hat{\mathcal{H}}_z \frac{dy}{dt} - \hat{\mathcal{H}}_y \frac{dz}{dt} = \frac{1}{2} \left\{ \hat{\mathcal{H}}_z \frac{dy}{dt} + \frac{dy}{dt} \hat{\mathcal{H}}_z - \hat{\mathcal{H}}_y \frac{dz}{dt} - \frac{dz}{dt} \hat{\mathcal{H}}_y \right\} + \frac{i\hbar}{2m} \operatorname{rot}_x \hat{\vec{\mathcal{H}}}.$$

Підставляючи цей вираз в (12.7), приходимо до результату

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial x} - e \hat{E}_x - \frac{e}{2c} \left\{ \hat{\mathcal{H}}_z \frac{dy}{dt} + \frac{dy}{dt} \hat{\mathcal{H}}_z - \hat{\mathcal{H}}_y \frac{dz}{dt} - \frac{dz}{dt} \hat{\mathcal{H}}_y \right\} \quad (12.8)$$

Звідси видно, що оператор Лоренца має вигляд (заряд $-e$)

$$\hat{F}_x = -e \hat{E}_x - \frac{e}{2c} \left\{ \left(\hat{\mathcal{H}}_z \frac{dy}{dt} + \frac{dy}{dt} \hat{\mathcal{H}}_z \right) - \left(\hat{\mathcal{H}}_y \frac{dz}{dt} + \frac{dz}{dt} \hat{\mathcal{H}}_y \right) \right\} \quad (12.9)$$

Зауваження. Всі викладки, що приведені в цієї главі, зроблені в гаусівській системі, яка вважається кращою в квантовій механіці та в теорії

поля. Щоб перейти до СІ треба відкинути множник $\frac{1}{c}$ у (12.3) і далі, а замість магнітного поля $\vec{\mathcal{H}}$ використовувати вектор індукції магнітного поля $\vec{B}$, тобто електродинамічні потенціали повинні визначати поля наступним чином

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A}, \vec{E} = -\text{grad } \varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}.$$

§13 Метод вторинного квантування

Ансамблі однакових (тотожних) частинок (див. § 10) можуть бути розглянуті особливим методом, який має назву вторинного квантування. Його суть полягає в тому, що в якості незалежних змінних для опису ансамблю замість повного набору механічних величин, що характеризують індивідуальні стани окремих частинок, використовують числа частинок у цих станах. Кожний з цих станів будемо характеризувати трьома змінними: L_1, L_2, L_3 , що відносяться до руху центра тяжіння, та спінової змінної s , якщо частинки мають спін. За для спрощення математичного апарату будемо вважати, що ці змінні мають дискретний спектр, так що всі стани можна перенумерувати числом n (під n розуміємо сукупність значень чотирьох величин: L_1, L_2, L_3, s).

Звичайно гамільтоніан дається в координатному представленні, тому ми спочатку здійснимо перетворення від координатного представлення до " L "-представлення, яке будемо вважати дискретним. (Вичерпна теорія вторинного квантування, що охоплює також і випадок неперервної послідовності станів, була розроблена В. Фоком).

Якщо в координатному представленні хвильова функція системи N однакових частинок буде $\psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$ то рівняння Шредінгера для цієї системи має вигляд

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ \sum_{k=1}^N \hat{H}(q_k) + \sum_{k>j}^N W(q_k, q_j) \right\} \psi \quad (13.1)$$

де $\hat{H}(q_k) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_k^2 + U(q_k)$ є оператор енергії k -ої частинки, $U(q_k)$ – потенціальна енергія k -ої частинки у зовнішньому полі, $W(q_k, q_j)$ – енергія взаємодії k -ої і j -ої частинок. Розкладемо зараз хвильову функцію ψ по власним функціям $\psi_{n_k}(q_k)$ операторів $\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3, \hat{S}$. Отримаємо

$$\begin{aligned} \psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t) = \\ = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_N} c(n_1, n_2, \dots, n_N, t) \psi_{n_1}(q_1) \psi_{n_2}(q_2) \dots \psi_{n_N}(q_N) \end{aligned} \quad (13.2)$$

де $c(n_1, n_2, \dots, n_N, t)$ є, очевидно, хвильова функція системи в "L" - представленні.

$|c(n_1, n_2, \dots, n_N, t)|^2$ є імовірність того, що перша частинка знаходиться у стані n_1 (має четвірку L_1, L_2, L_3, S , яка позначена однією літерою n_1), друга частинка у стані n_2 (має четвірку L'_1, L'_2, L'_3, S' , що позначена n_2) тощо. Підставляючи (13.2) в (13.1), множачи зліва на $\psi_{m_1}^*(q_1) \psi_{m_2}^*(q_2) \dots \psi_{m_N}^*(q_N)$ і інтегруючи по $q_1, q_2, \dots, q_N$, отримаємо

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} c(m_1, m_2, \dots, m_k, \dots, m_j, \dots, m_N, t) = \\ = \sum_{k=1}^N \sum_{n_k} H_{m_k n_k} c(m_1, m_2, \dots, n_k, \dots, m_j, \dots, m_N, t) \\ + \sum_{k>j}^N \sum_{n_k} \sum_{n_j} W_{m_k m_j n_k n_j} c(m_1, m_2, \dots, n_k, \dots, n_j, \dots, m_N, t) \end{aligned} \quad (13.3)$$

Тут $H_{m_k n_k}$ і $W_{m_k m_j n_k n_j}$ – матричні елементи.

$$H_{m_k n_k} = \int \psi_{m_k}^*(q_k) \hat{H}(q_k) \psi_{n_k}(q_k) dq_k, \quad (13.4)$$

$$W_{m_k m_j n_k n_j} = \int \psi_{m_k}^*(q_k) \psi_{m_j}^*(q_j) W(q_k, q_j) \psi_{n_k}(q_k) \psi_{n_j}(q_j) dq_k dq_j \quad (13.5)$$

Рівняння (13.3) є рівняння (13.1) в "L" -представленні. Внаслідок однаковості частинок матричні елементи (13.4) і (13.5) залежать лише від значення квантових чисел m_k, m_j, n_k, n_j , а не від номера частинок k, j . Позначаючи будь-яке значення m_k через m , n_k через n , таким же чином m_j

через m' , n_j через n' , координати k -ої частинки через q , а j через q' , ми можемо написати (13.4) та (13.5) у вигляді

$$\begin{aligned} H_{m_k n_k} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int \psi_m^*(q) \nabla^2 \psi_n(q) dq + \int \psi_m^*(q) U(q) \psi_n(q) dq = \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \nabla \psi_m^*(q) \nabla \psi_n(q) dq \\ &\quad + \int \psi_m^*(q) U(q) \psi_n(q) dq \end{aligned} \quad (13.6)$$

$$W_{m_k m_j n_k n_j} = \int \psi_m^*(q_k) \psi_{m'}^*(q') W(q, q') \psi_n(q) \psi_{n'}(q') dq dq' = W_{mm'nn'} \quad (13.7)$$

Амплітуди $c(m_1, m_2, \dots, m_N, t)$ (хвильова функції в " L "-представленні) є симетричними функції квантових чисел $m_1, m_2, \dots, m_N$ для частинок Бозе і антисиметричними функції для частинок Фермі. Тому значення цих амплітуд залежить лише від того, скільки аргументів з їх повного числа $N(m_1, m_2, \dots, m_N)$ дорівнює m , скільки дорівнює $m', m'', \dots$ тощо, а не від того, які саме з цих аргументів дорівнюють $m, m', m'', \dots$, тобто ці амплітуди є функції числа частинок у кожному зі станів.

Позначимо ці числа $N_1, N_2, \dots, N_m, \dots, N_{m'}, \dots, N_{m''}, \dots$ тощо. Отже, наприклад, N_m дорівнює числу чисел m_k серед аргументів $c(m_1, m_2, \dots, m_N, t)$, значення яких дорівнює m , $N_{m'}$ дорівнює числу чисел m_k , значення яких дорівнює m' тощо.

У випадку частинок Бозе числа N_m можуть бути будь-якими. Але ж у випадку частинок Фермі, внаслідок принципу Паулі, функція $c(m_1, m_2, \dots, m_N, t)$ обертається в нуль, якщо хоч два числа m_k, m_j рівні між собою, так, що N_m приймає лише два значення 0 чи 1: стан може бути зайнятий однією частинкою чи взагалі не зайнятий.

У подальшому розглянемо перетворення для частинок Бозе. Задача полягає тепер у тому, щоб написати рівняння Шредінгера (13.3), узявши в якості змінних замість квантових чисел $m_1, m_2, \dots, m_N$ числа частинок в цих станах $N_1, N_2, \dots, N_m, \dots$. Для цього треба насамперед змінити нормування амплітуд c . Дійсно, якщо розглядати c як функцію чисел $N_1, N_2, \dots, N_m, \dots$, то

$|c(N_1, N_2, \dots, N_m, \dots, t)|^2$ є імовірність знаходження N_1 частинок в стані 1, N_2 частинок 2, $\dots$, N_m частинок в стані m тощо. Ця ж імовірність через $c(m_1, m_2, \dots, m_N, t)$ може бути записана у вигляді

$$|c(N_1, N_2, \dots, N_m, \dots, t)|^2 = \sum |c(m_1, m_2, \dots, m_N, \dots, t)|^2, \quad (13.8)$$

де сума береться за всіма $c(m_1, m_2, \dots, m_N, \dots, t)$, які мають N_1 чисел m_k , що дорівнюють 1, N_2 чисел m_k , що дорівнюють 2, тощо. Внаслідок симетрії всі ці c рівні між собою. Тому

$$|c(N_1, N_2, \dots, N_m, \dots, t)|^2 = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_m!} |c(m_1, m_2, \dots, m_N, \dots, t)|^2, \quad (13.8')$$

звідки

$$c(N_1, N_2, \dots, N_m, \dots, t) = \left(\frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_m!} \right)^{1/2} c(m_1, m_2, \dots, m_N, \dots, t) \quad (13.9)$$

Підставляючи тепер у (13.3) замість $c(m_1, m_2, \dots, m_N, \dots, t)$ амплітуди $c(N_1, N_2, \dots, N_m, \dots, t)$ ми можемо виконати підсумовування за номерами частинок k і j . Для цього використаємо (13.6) і (13.7) та зауважимо, що $c(m_1, m_2, \dots, m_k, \dots, m_j, \dots, m_N, t)$ відрізняється від $c(m_1, m_2, \dots, n_k, \dots, m_j, \dots, m_N, t)$ тим, що число частинок у стані $m_k = m$ зменшилось на 1, а число частинок у стані $n_k = n$ збільшилось на 1.

Так само $c(m_1, m_2, \dots, m_k, \dots, m_j, \dots, m_N, t)$ відрізняється від $c(m_1, m_2, \dots, n_k, \dots, n_j, \dots, m_N, t)$ тим, що число частинок у станах $m_k = m$, $m_j = m'$ зменшилось на 1, а в станах $n_k = n$, $n_j = n'$ збільшилось на 1.

На основі цих зауважень знаходимо

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \left\{ \left(\frac{N_1! \dots N_m! \dots N_{m'}! \dots N_n! \dots N_{n'}! \dots}{N!} \right)^{1/2} c(N_1, \dots, N_m, \dots, N_{m'}, \dots, N_n, \dots, N_{n'}, \dots, t) \right\} = \\ \sum_{n,m} N_m H_{mn} \left(\frac{N_1! \dots (N_m-1)! \dots N_{m'}! \dots (N_n+1)! \dots N_{n'}! \dots}{N!} \right)^{1/2} \times c(N_1, \dots, N_m-1, \dots, N_{m'}, \dots, N_n+1, \dots, N_{n'}, \dots, t) + \\ \frac{1}{2} \sum_{m,m'} \sum_{n,n'} N_m N_{m'} W_{mm',nn'} \left(\frac{N_1! \dots (N_m-1)! \dots (N_{m'}-1)! \dots (N_n+1)! \dots (N_{n'}+1)! \dots}{N!} \right)^{1/2} \times \\ c(N_1, \dots, N_m-1, \dots, N_{m'}-1, \dots, N_n+1, \dots, N_{n'}+1, \dots, t) \end{aligned} \quad (13.10)$$

Поділимо (13.10) на $\left(\frac{N!}{N_1!N_2!\dots}\right)^{-1/2}$. Отримаємо

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} c(N_1, \dots, N_m, \dots, N_{m'}, \dots, N_n, \dots, N_{n'}, \dots, t) = \sum_{n,m} N_m^{1/2} (N_n + 1)^{1/2} H_{mn} c(N_1, \dots, N_m - 1, \dots, N_{m'}, \dots, N_n + 1, \dots, N_{n'}, \dots, t) + \\ \frac{1}{2} \sum N_m^{1/2} N_{m'}^{1/2} (N_n + 1)^{1/2} (N_{n'} + 1)^{1/2} W_{mm',nn'} \times c(N_1, \dots, N_m - 1, \dots, N_{m'} - 1, \dots, N_n + 1, \dots, N_{n'} + 1, \dots, t) \end{aligned} \quad (13.11)$$

Це є шукане рівняння, у якому за незалежні змінні взяті числа частинок в окремих станах. Це рівняння може бути записано у дуже зручній формі, якщо ввести оператори $\hat{a}_n$ і $\hat{a}_n^*$, які діють на функції від чисел N_n таким чином:

$$\hat{a}_n^* f(N_1, N_2, \dots, N_n, \dots, N_m, \dots) = (N_n + 1)^{1/2} f(N_1, N_2, \dots, N_n + 1, \dots, N_m, \dots) \quad (13.12)$$

$$\hat{a}_n f(N_1, N_2, \dots, N_n, \dots, N_m, \dots) = N_n^{1/2} f(N_1, N_2, \dots, N_n - 1, \dots, N_m, \dots) \quad (13.12')$$

$$\hat{a}_n f(N_1, N_2, \dots, 0_n, \dots, N_m, \dots) = 0 \quad (13.12'')$$

Ці оператори, очевидно, мають такі властивості:

$$\hat{a}_n^* \hat{a}_n = N_n, \hat{a}_n \hat{a}_n^* = N_n + 1 \quad (13.13)$$

$$\hat{a}_m \hat{a}_n^* - \hat{a}_n^* \hat{a}_m = \delta_{mn} \quad (13.14)$$

(Зараз читачу буде корисним звернутися до § 5)

Тепер неважко бачити, що за допомогою цих операторів рівняння (13.11) може бути написано у вигляді

$$i\hbar \frac{dc(N_1, N_2, \dots, t)}{dt} = \hat{H} c(N_1, N_2, \dots, t), \quad (13.15)$$

де

$$\hat{H} = \sum_{m,n} \hat{a}_m^* H_{mn} \hat{a}_n + \frac{1}{2} \sum_{m,m'} \sum_{n,n'} \hat{a}_m^* \hat{a}_{m'}^* W_{mm',nn'} \hat{a}_n \hat{a}_{n'} \quad (13.16)$$

Гамільтоніан (13.16) звичайно називають вторинно квантованим. Рівняння (13.15) цілком еквівалентно вихідному рівнянню (3.1) для N частинок у конфігураційному просторі. по сутності рівняння (13.15) є рівняння (13.1) у " N "-представленні, тобто у представленні, в якому у якості змінних взяті числа частинок $N_1, N_2, \dots, N_m, \dots$ у різних квантових станах

1, 2, ..., m , ... Зазначимо також, що рівняння (13.15) має місце для будь-якого числа N однакових частинок Бозе.

Гамільтоніан (13.16) можна написати у другій формі, яка відповідає енергії деякого хвильового поля.

Нехай хвильова функція однієї частинки є $\psi(q)$. Розкладемо цю функцію за власними функціями $\psi_n(q)$ операторів $\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3, \hat{s}$:

$$\psi(q) = \sum_n a_n \psi_n(q) \quad (13.17)$$

Будемо тепер розглядами амплітуди a_n ні як числа, а як оператори зі властивостями (13.14). Тоді сама функція ψ буде оператором

$$\hat{\Psi}(q) = \sum_n \hat{a}_n \psi_n(q), \quad (13.18)$$

що діє на числа $N_1, N_2, \dots, N_m, \dots$. Перехід від (13.17) до (13.18) означає, що ми перейшли від чисел до операторів, тобто ми у деякому сенсі перейшли від класичної теорії до квантової. Однак, оскільки опис руху однієї частинки за допомогою хвильового поля $\psi(q)$ вже сам по собі є квантовим, то зміну амплітуди a_n на оператори $\hat{a}_n$ називають вторинним квантуванням, а хвильову функцію $\hat{\Psi}$ звать квантованою хвильовою функцією. (Слід пам'ятати, однак, що хвильовою функцією у звичайному розумінні в теорії вторинного квантування є функція $c(N_1, N_2, \dots, N_m, \dots, t)$, а ні $\hat{\Psi}$).

Зауважимо, що перехід від неквантованої хвильової функції (13.17) до квантованої (13.18) може бути сформований без звернення до операторів $\hat{a}_n$. Дійсно, зі (13.14) і (13.18) витікає

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(q)\hat{\Psi}^*(q') - \hat{\Psi}^*(q')\hat{\Psi}(q) &= \sum_{m,n} (\hat{a}_n \hat{a}_m^* - \hat{a}_m^* \hat{a}_n) \psi_n(q) \psi_m^*(q') \\ &= \sum_{m,n} \delta_{mn} \psi_m^*(q') \psi_n(q) = \sum_n \psi_n^*(q') \psi_n(q) \end{aligned}$$

де сума розповсюджена по всім власним функціям. Така сума, що можна довести, дорівнює $\delta(q' - q)$. Тому квантування хвильової функції можна записати у вигляді

$$\hat{\Psi}(q)\hat{\Psi}^*(q') - \hat{\Psi}^*(q')\hat{\Psi}(q) = \delta(q' - q). \quad (13.19)$$

За допомогою квантової хвильової функції $\hat{\Psi}(q)$ (13.18) гамільтоніан (13.16) можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \nabla \hat{\Psi}^*(q) \int \nabla \hat{\Psi}(q) dq + \int \hat{\Psi}^*(q) U(q) \hat{\Psi}(q) dq + \\ & + \frac{1}{2} \iint \hat{\Psi}^*(q) \hat{\Psi}^*(q') W(q, q') \hat{\Psi}(q) \hat{\Psi}(q') dq dq' \end{aligned} \quad (13.20)$$

Еквівалентність (13.20) і (13.16) очевидна, якщо урахувати (13.17) та вирази для матричних елементів (13.6) і (13.7).

В такій формі гамільтоніан $\hat{H}$ (13.20) можна розглядати як енергію деякого хвильового поля, яке «квантовано» у тому сенсі, що класичне поле $\psi(q)$ замінено на оператор $\hat{\Psi}(q)$. Дійсно, будемо розглядати під $\psi(q)$ хвильове поле де Бройля-Шредінгера і припустимо, що окремі елементи цього поля взаємодіють між собою так, що енергія взаємодії двох елементів пропорційна добутку густин $|\psi(q)|^2 |\psi(q')|^2$. «Класичне» рівняння для такого поля буде

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(q) + U(q)\psi(q) + \psi(q) \int W(q, q') |\psi(q')|^2 dq' \quad (13.21)$$

Це рівняння відрізняється від правильного рівняння Шредінгера для однієї частинки останнім членом, який виражає припущення самовпливу ψ -хвиль.

Повна енергія такого поля буде дорівнювати

$$H = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int |\nabla \psi(q)|^2 dq + \int |\psi(q)|^2 U(q) dq + \frac{1}{2} \int |\psi(q)|^2 |\psi(q')|^2 W(q, q') dq dq' \quad (13.22)$$

Якщо зараз розмістити тут ψ і ψ^* належним чином і замінити їх на оператори $\hat{\Psi}$ і $\hat{\Psi}^*$, що підкорюються правилу переставлення (13.19), то ми отримаємо точно гамільтоніан (13.20). Звідси видно, що теорія вторинного квантування допускає наступний незвичайний підхід до теорії систем однакових частинок: розглядається деяке класичне поле ψ . Для нього знаходиться вираз енергії H . У цьому виразі класичне поле ψ замінюється на

оператор $\hat{\Psi}$. Тоді ми приходимо до гамільтоніану $\hat{H}$ теорії вторинного квантування і отримаємо право говорити про частинки, що властиві полю ψ : після квантування поле виявляє дискретну, корпускулярну природу. Ця процедура носить назву «квантування поля». Її сила полягає в тому, що вона може бути застосована до будь-якого класичного поля.

Зараз розглянемо, яким чином можна знайти квантування для випадку частинок Фермі. Відмінність з розглянутим вище випадком (частинки Бозе) полягає лише у властивостях операторів $\hat{a}$, $\hat{a}^*$. Щоб знайти ці оператори, треба здійснити знову перетворення рівняння (13.3) від змінних $m_1, m_2, \dots, m_N$ до змінних $N_1, N_2, \dots, N_m, \dots$, яке для частинок Фермі декілька більш клопітливо завдяки тому, що при переставленні частинок функції $c(m_1, m_2, \dots, m_N, t)$ змінюють свій знак. Далі, числа N_m можуть мати лише два значення: 1 і 0. Відтворюючи східні перетворення, ми отримуємо з (13.3) знову рівняння (13.15) із гамільтоніаном (13.16), але оператори $\hat{a}$, $\hat{a}^*$ будуть визначені у цьому випадку іншим чином, а саме

$$a_n^* f(N_1, N_2, \dots, 0_n, \dots, N_m, \dots) = \pm f(N_1, N_2, \dots, 1_n, \dots, N_m, \dots), \quad (13.23)$$

$$\hat{a}_n^* f(N_1, N_2, \dots, 1_n, \dots, N_m, \dots) = 0, \quad (13.23')$$

$$\hat{a}_n f(N_1, N_2, \dots, 0_n, \dots, N_m, \dots) = 0, \quad (13.23'')$$

$$\hat{a}_n f(N_1, N_2, \dots, 1_n, \dots, N_m, \dots) = \pm f(N_1, N_2, \dots, 0_n, \dots, N_m, \dots), \quad (13.23''')$$

причому знак $+$ чи $-$ береться в залежності від того, парне чи непарне число зайнятих станів ($N_m = 1$) передуює стану n , якщо стани розмістити у порядку зростання n .

З цих правил витікає

$$\hat{a}_n^* \hat{a}_n = N_n \text{ (0 чи 1)}, \hat{a}_n \hat{a}_n^* = 1 - N_n, \quad (13.24)$$

$$\hat{a}_n \hat{a}_m^* + \hat{a}_m^* \hat{a}_n = \delta_{mn}. \quad (13.25)$$

Як бачимо, правило переставлення для операторів $\hat{a}$ у випадку частинок Фермі відрізняється знаком від правил переставлення для частинок Бозе.

Користуючись (13.17) і повторюючи викладки, що призводять до (13.19), отримаємо

$$\hat{\Psi}(q)\hat{\Psi}^*(q') + \hat{\Psi}^*(q')\hat{\Psi}(q) = \delta(q' - q) \quad (13.26)$$

Всі останні формули, зокрема, вираз для $\hat{H}$ (13.20), залишаються без змін. Таким чином, гамільтоніан $\hat{H}$ сумісно із правилом квантування (13.26) можна розглядати як вторинно квантований гамільтоніан для електронних хвиль, «класичне» рівняння для яких є (13.22). Правило квантування для обох випадків може бути записано однією формулою

$$[\hat{\Psi}(q), \hat{\Psi}^*(q')]_{\pm} = \delta(q' - q), \quad (13.27)$$

причому знак $+$ береться для частинок Фермі, а знак $-$ для частинок Бозе.

Одним з головних напрямків сучасної фізики є дослідження систем зі змінним числом частинок. Методи вторинного квантування дозволили розвинути теорію, що описує поведінку таких систем. В цій теорії оператори $\hat{a}$ та $\hat{a}^*$ відіграють роль так званих операторів поглинання (знищення) та випромінювання (народження) частинок (див. §5). На базі цих міркувань базується квантова теорія поля (квантова електродинаміка, теорія елементарних частинок тощо).

§14 Дворівневі системи

Як відомо із загального курсу квантової механіки, опис зміни довільного квантового стану з часом зводиться до обчислення амплітуд імовірності переходів між базисними станами.

Принципова схема рішення нестационарних задач квантової динаміки зовнішньо проста, але досить громіздка. Однак, для демонстрації найважливіших фізичних особливостей переходів між квантовими станами використовувати цю схему повністю немає потреби. Як виявляється, можна досягти тієї ж мети, розглядаючи найпростішу мікросистему з двома базисними станами, тобто дворівневу систему. Вона дозволяє змодельовати відповідні переходи у багатьох складних системах. Теорія таких систем виникла у зв'язку з розвитком квантової електроніки у середині XX ст. і виявилась вельми плідною для вирішення багатьох задач сучасної фізики. З

основами фізики дворівневих систем та їх застосування можна ознайомитися в [1-3].

Тут ми обмежимося загальним описом дворівневої системи та в якості важливого приклада такої системи розглянемо спин електрона в магнітному полі.

Почнемо з задачі про заряджену мікрочастинку в потенціальній ямі висоти U_0 , що знаходиться у змінному зовнішньому електричному полі з енергією взаємодії $U^{\text{зовн.}}(x, t) = -qE_x(t)x$. Розуміється, форма стінок ями при цьому змінюється і вихідні базисні стани стають нестаціонарними (можливий тунельний ефект) (згадайте про задачу про холодну емісію електронів з металу). Однак для низьких рівнів (малі n) можна наближено вважати, що хвильові функції та енергетичні рівні залишаються колишніми. Очевидно, що в цьому випадку гамільтонова матриця має вигляд

$$U_{mn}^{\text{зовн.}} = -qE_x(t)\langle m|x|n\rangle = -qE_x(t)x_{mn} \quad (14.1)$$

Характер матричних елементів (при малих n)

$$x_{mn} = \int_0^1 \psi_m(x)x\psi_n(x)dx \quad (14.2)$$

можна оцінити, підставляючи в (14.2) базисні хвильові функції для нескінченно глибокої ями $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L}x$. При цьому виявляється, що елементи $x_{mn} \neq 0$ тільки якщо числа m і n мають різні парності (зокрема, $x_{nn} = 0$). Більш того, різні елементи x_{mn} досить різні за величиною і максимальні лише для сусідніх базисних станів, коли $m = n \pm 1$.

Звідси витікає, що в цієї задачі найбільш імовірні переходи із стану n у сусідні стани з номерами $(n \pm 1)$. При переході на рівень з номером $(n + 1)$ енергія системи зростає на $\Delta\mathcal{E} = \mathcal{E}_{n+1} - \mathcal{E}_n$, що відповідає поглинанню чи випромінюванню електромагнітного кванта. Завдяки цьому, хоч мікрочастинка у потенціальній ямі (при $E_x = \text{const}$) має множину станів, з точки зору амплітуд ймовірностей переходів завжди істотні лише два сусідніх стани. Опис переходів між ними можна наближено вести так, як би останні стани взагалі відсутні. Тим самим для з'ясування важливих

особливостей квантових переходів у таких системах достатньо розглянути модельну систему, що володіє всього двома базисними станами.

Якщо зовнішнє поле $E_x(t)$ само змінюється по гармонічному закону з частотою Ω , то його вплив на систему, як можна переконатися [4], має резонансний характер. В цьому випадку також найбільш імовірними є переходи лише між двома станами незалежно від значення $x_{mn} \neq 0$, однак, такими, що для них

$$\omega_{mn} = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_m}{\hbar} = \Omega.$$

Взагалі, досить часто зустрічаються ситуації, коли будь-які два стани в системі виділені фізично. Зокрема, якщо рівні енергії системи дискретні, тобто розділені кінцевими проміжками $\Delta\varepsilon_{nm}$, то досить слабкий додатній вплив призводить лише до «розщеплення» кожного з вихідних рівнів на два близьких рівні $\varepsilon_{I,II} = (\varepsilon_n \mp \Delta\varepsilon_{\text{дод.}})$, причому $\Delta\varepsilon_{\text{дод.}} \ll \Delta\varepsilon_{nm}$. В цьому випадку зовнішній вплив на систему можна розглядати незалежно від кожного номера n , умовно вважаючи, що ми маємо справу з підсистемою, що містить всього два рівня енергії: ε_I та ε_{II} .

Існує множина прикладів дворівневих систем, з яких важливе місце займають спін електрона, що знаходиться в одному з базисних станів атома водню, що поміщений у магнітне поле, молекулярний іон водню H_2^+ , молекула аміаку NH_3 тощо.

Проблеми квантової динаміки доцільно обговорити на прикладі дворівневої системи, у якій вектор стану $|\Psi(t)\rangle$ у довільний момент стану має вигляд суперпозиції двох базисних, взагалі кажучи, нестаціонарних станів:

$$|\Psi(t)\rangle = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle. \quad (14.3)$$

Система рівнянь для амплітуд імовірності, згідно загальної теорії, приймає тут вигляд

$$\begin{cases} i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1 + H_{12}C_2, \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21}C_1 + H_{22}C_2, \end{cases} \quad (14.4)$$

де елементи гамільтонової матриці H_{ij} в загальному випадку містять зовнішній вплив, що залежить від часу.

При постійних коефіцієнтах H_{ij} рішення (14.4) полягає в переході від початкових невідомих $C_i(t)$, що відповідають нестаціонарним станам, до їх комбінацій C'_{ij} , чи нормальним модам, що володіють гармонічною залежністю від часу, типовою для стаціонарних станів:

$$C_i(t) = \sum_{j=I,II} C'_{ij}(t) = \sum_{j=I,II} a_{ij} e^{-i\omega_j t}. \quad (14.5)$$

Тут $a_{ij} = a_{ji}$ – внесок моди типу j у вихідну амплітуду імовірності $C_i(0)$ чи амплітуда імовірності при $t = 0$ у нестаціонарному стані $|i\rangle$ стаціонарний стан $|j'\rangle$, а $\omega_j = \frac{\mathcal{E}_j}{\hbar}$ – невідома спочатку частота моди j .

Щоб знайти частоти мод ω_j чи енергії стаціонарних станів $\mathcal{E}_j = \hbar\omega_j$ і амплітуди імовірності a_{ij} підставимо в систему рівнянь (14.4) замість $C_i(t)$ припустимі окремі розв'язки, що гармонічно залежать від часу із енергією $\mathcal{E}_j$:

$$C_1(t) = a_{1j} e^{-i\frac{\mathcal{E}_j}{\hbar}t}, C_2(t) = a_{2j} e^{-i\frac{\mathcal{E}_j}{\hbar}t}, \quad (14.6)$$

Отримаємо систему алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} \mathcal{E}_j a_{1j} = H_{11} a_{1j} + H_{12} a_{2j}, \\ \mathcal{E}_j a_{2j} = H_{21} a_{1j} + H_{22} a_{2j}, \end{cases} \quad (14.7)$$

Кожне з цих рівнянь дозволяє знайти відношення коефіцієнтів a_{1j} і a_{2j} , так що

$$\frac{a_{1j}}{a_{2j}} = \frac{H_{12}}{\mathcal{E}_j - H_{11}} = \frac{\mathcal{E}_j - H_{22}}{H_{21}}. \quad (14.8)$$

Використаємо спочатку друге з цих рівнянь. Воно зображує собою квадратне рівняння для невідомих значень енергій стаціонарних станів системи:

$$(\mathcal{E}_j - H_{11})(\mathcal{E}_j - H_{22}) - H_{21}H_{12}. \quad (14.9)$$

Рішення його є

$$\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_{I,II} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + |H_{12}|^2}, \quad (14.10)$$

де з урахуванням умови ермітовості величина $|H_{12}|^2 = H_{21}H_{12}$ дійсна і додатна. Знаючи енергії стаціонарних станів і підставляючи послідовно в перше рівняння (14.8) чи $\mathcal{E}_I$, чи $\mathcal{E}_{II}$, можна знайти відношення $\frac{a_{1j}}{a_{2j}}$.

Для остаточного розрахунку амплітуд імовірності a_{ij} необхідно використати початкові значення $C_i(0)$ та умову нормування $\sum_i |C_i(0)|^2 = 1$.

При цьому слід пам'ятати, що у початковий момент часу $t = 0$ розкладання $C_i(0) = \sum_j a_{ij}$, що витікає з (14.5) правильно незалежно від того, які з двох наборів базисних станів $|i\rangle$ чи $|j'\rangle$ є стаціонарними, а які – нестаціонарними. відмінність між цими випадками лише в подальші моменти часу, коли для нестаціонарних станів $|i\rangle$ має місце (14.5), а для стаціонарних станів $|i\rangle$ маємо

$$C_i(t) = e^{-i\frac{\mathcal{E}_j}{\hbar}t} C_i(0) = e^{-i\frac{\mathcal{E}_j}{\hbar}t} \sum_j a_{ij} \quad (14.5')$$

Для зручності подальшого аналізу декілька спростимо форму виразу (14.10). Покладемо, що

$$H_{11} = \mathcal{E}_0 - \alpha; H_{22} = \mathcal{E}_0 + \alpha. \quad (14.11)$$

Далі комплексні величини H_{12} і H_{21} з урахуванням умови ермітовості завжди можна записати у вигляді

$$H_{12} = -(\beta - i\gamma), H_{21} = -(\beta + i\gamma), \quad (14.11')$$

так що $|H_{12}|^2 = \beta^2 + \gamma^2$ (загальний знак « $-$ » тут не істотний).

Таким чином, замість (14.10) отримаємо

$$\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_0 \mp \sqrt{\alpha^2 + (\beta^2 + \gamma^2)}, \quad (14.12)$$

де α, β, γ – внески від взаємодії чи зовнішнього впливу, що призводить до «розщеплення» рівня $\mathcal{E}_0$ і до втрати станом $|i\rangle$ (при $\beta \neq 0$ чи $\gamma \neq 0$) властивості стаціонарності.

Отримані співвідношення (14.11)–(14.12) між енергіями стаціонарних станів $\mathcal{E}_j$ і елементами гамільтонової матриці H_{ij} прийнято використовувати подвійно. Якщо елементи H_{ij} вигляду (14.11) відомі з досліду чи незалежних фізичних міркувань, то ці формули дозволяють обчислити енергії

стаціонарних станів систем $\mathcal{E}_j$. Якщо ж. навпаки, з досліду чи будь-яких фізичних міркувань відомі енергії $\mathcal{E}_j$, то їх можна використати для «угадування» самої гамільтонової матриці H_{ij} .

Що до амплітуд імовірності переходу $C_i(t)$, що визначаються формулами (14.5) та (14.8), то їх залежність від часу істотно визначається тим, чи залишаються (при наявності зовнішнього впливу) початкові базисні стани стаціонарними чи вони перетворюються у нестаціонарні.

Може виникнути питання: чи має сенс взагалі використовувати нестаціонарні базисні стани тоді, коли, як і вище, система (при наявності зовнішнього впливу) володіє принципово стаціонарними станами з енергіями $\mathcal{E}_j$? Відповідь полягає в тому, що дуже часто прилади, що фіксують початкові чи кінцеві умови, відокремлюють саме нестаціонарні базисні стани. Зупинимо далі увагу на приклад конкретної дворівневої системи – спіна електрона в магнітному полі.

Розглядання спіна електрона в якості дворівневої системи особливо доцільно тому, що у цьому випадку початкові чи кінцеві базисні стани можуть бути фізично виділені приборами типу Штерна-Герлаха незалежно від того, як при цьому спрямоване магнітне поле $\vec{B}$ і чи є ці стани стаціонарні чи ні. Припустимо за для ради спрощення, що ми розглядаємо електрони в основному стані атома водню з енергією $\mathcal{E}_0$. Якщо енергія зовнішнього впливу $\Delta\mathcal{E}_{\text{дод.}} = (\vec{\mu}\vec{B}) \ll \Delta\mathcal{E}_{01} = \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0$, то стан поступового руху електрона в атомі під впливом поля $\vec{B}$ не змінюється, тобто ми маємо справу з типовою дворівневою системою.

В якості базисних тут зручно вибрати два стани з визначеними значеннями проекції спіна електрона на вісь приладу типу Штерна-Герлаха. У відсутності магнітного поля вони стаціонарні при будь-якій орієнтації осі, причому їм відповідає одна і та ж енергія $\mathcal{E}_0$.

Припустимо тепер, що увімкнене магнітне поле $\vec{B}$, спрямованість якого може і не співпадати із орієнтацією приладу типу Штерна-Герлаха. За

аналогією з класичною формулою $U^{\text{зов}} = -(\vec{\mu}\vec{B})$ допустимо, що оператор енергії зовнішнього впливу на стан електрона має вигляд

$$\hat{U}^{\text{зов}} = -(\hat{\vec{\mu}}\vec{B}), \quad (14.13)$$

де $\hat{\vec{\mu}}$ – оператор вектора магнітного моменту електрона.

Оскільки спін електрона може бути орієнтований тільки за чи проти спрямованості поля $\vec{B}$, цей оператор володіє двома власними значеннями:

$$(U^{\text{зов}})_j = \mp \mu_B B = \mp \mu_B \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}, \quad (14.14)$$

де B – модуль поля $\vec{B}$, а μ_B – магнетон Бора

Форма гамільтонової матриці суттєво залежить від того, чи співпадають орієнтування поля $\vec{B}$ та осі приладу типу Штерна-Герлаха, що фіксує початкові базисні стани системи. Якщо ці два напрямки співпадають, то початкові базисні стани при увімкненні поля $\vec{B}$ залишаються стаціонарними. Гамільтонова матриця отримує тоді вигляд

$$H_{ij} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_I & 0 \\ 0 & \mathcal{E}_{II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_0 - \mu_B B & 0 \\ 0 & \mathcal{E}_0 + \mu_B B \end{pmatrix} \quad (14.15)$$

Інакше кажучи, вплив магнітного поля $\vec{B}$ призводить до того, що два стани спіна електрона з однаковою енергією тепер «розщепились» на два стани з дещо різними енергіями:

$$\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_0 \mp \mu_B B = \mathcal{E}_0 \mp \mu_B \sqrt{B_z^2 + (B_x^2 + B_y^2)} \quad (14.16)$$

Якщо ж спрямованість осі приладу Штерна-Герлаха і спрямованість магнітного поля різні, то початкові базисні стани завдяки увімкненню поля $\vec{B}$ стають нестаціонарними. Спробуємо «угадати» форму гамільтонової матриці H_{ij} і в цьому випадку, обираючи за для визначеності вісь приладу Штерна-Герлаха, що задає початкові базисні стани $|1\rangle$ та $|2\rangle$, за вісь Z . Самі вирази для енергій стаціонарних станів (14.16) від цього не змінюються. змінюються лише конкретні вирази (14.11) для елементів гамільтонової матриці H_{ij} , що обумовлюють ті ж значення $\mathcal{E}_j$.

Будемо розмірковувати наступним чином. Якщо б поле $\vec{B}$ було також орієнтовано вздовж осі Z , то початкові базисні стани залишилися би стаціонарними, а гамільтонова матриця мала би вигляд

$$H_{ij} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_0 - \mu_B B_z & 0 \\ 0 & \mathcal{E}_0 + \mu_B B_z \end{pmatrix}, \quad (14.17)$$

аналогічний (14.15). Навпаки, при орієнтуванні поля $\vec{B}$ у площині (XY) початкові базисні стани повинні бути нестаціонарними, тому природно допустити, що недіагональні елементи H_{12} і H_{21} залежать тільки від проекцій B_x та B_y .

Порівняємо зараз загальні вирази (14.11)-(14.12) з формулами (14.16) та (14.17). Неважко бачити, що вони повністю співпадуть, якщо покласти

$$\alpha = \mu_B B_z; \beta = \mu_B B_x; \gamma = \mu_B B_y.$$

Остаточно гамільтонова матриця H_{ij} при довільному напрямку поля $\vec{B}$ відносно осі Z , що фіксує базисні стани системи $|1\rangle$ та $|2\rangle$, має вигляд

$$H_{ij} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_0 - \mu_B B_z & -\mu_B (B_x - iB_y) \\ -\mu_B (B_x + iB_y) & \mathcal{E}_0 + \mu_B B_z \end{pmatrix}. \quad (14.18)$$

Експеримент підтверджує правильність цього виразу. Більш того, хоч ми угадали форму гамільтонової матриці H_{ij} тільки у випадку постійного магнітного поля, виявилось, що формула (14.18) слухна і для змінного поля $\vec{B}(t)$, коли система, що розглядається взагалі не має стаціонарних станів.

Таким чином, у даній систем є два фізично виділених напрямки, що дозволяють задати два різних наборів базисних станів: поле $\vec{B}$ і вісь приладу типу Штерна-Герлаха. Тому опис еволюції довільного стану спіна електрона з часом можна зробити досить наочним. Це дозволяє, зокрема, порівняти поведінку магнітного моменту в магнітному полі в класичній і квантовій динаміці.

Для цього знайдемо загальний вираз для амплітуд імовірності переходів a_{ij} від одного набору базисних станів дворівневої системи до іншого. Припустимо, що магнітне поле $\vec{B}$ спрямоване довільно (вздовж осі

Z'), а вісь приладу Штерна-Герлаха співпадає з віссю Z (рис.14.1). У такому випадку стани спіна електрона $|j'\rangle$ з орієнтуванням вздовж осі Z' стаціонарні, а його стани $|i\rangle$ з орієнтуваннями вздовж осі Z нестаціонарні.

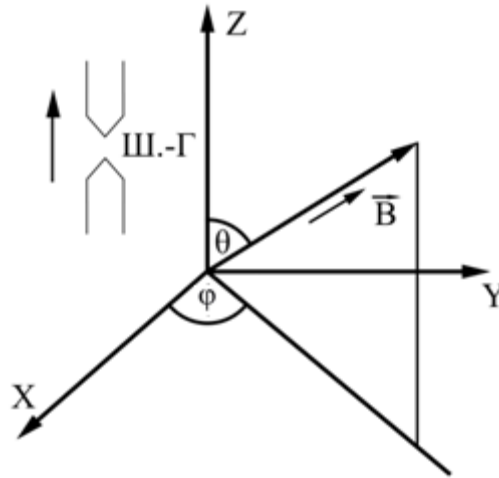


Рис.14.1

Припустимо для визначеності, що спін електрона з імовірністю одиниця знаходиться в стаціонарному стані $|I'\rangle \equiv |S_{z'} +\rangle$ з енергією $\mathcal{E}_1 = \mathcal{E}_0 - \mu_B B$. Це означає, що при $t = 0$ (з урахуванням $a_{ij} = a_{ji}$).

$$C_1(0) = a_{I,I} + a_{II,I}, \quad (14.19)$$

а у довільний момент часу $C_1(t) = C_1(0)e^{-i\frac{\mathcal{E}_I}{\hbar}t}$.

Відношення амплітуд $\frac{a_{I,I}}{a_{II,I}}$ визначається першим з рівнянь (14.8) з

$\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_I$, а самі амплітуди a_{jI} зв'язані умовою нормування

$$|C_i(0)|^2 = |a_{I,I}|^2 + |a_{II,I}|^2 = 1 \quad (14.20)$$

Для того, щоб їх обчислити явно, зручно спочатку виразити проекції поля у сферичних координатах:

$$B_z = B \cos \Theta, B_x = B \sin \Theta \cos \varphi, B_y = B \sin \Theta \sin \varphi.$$

Тоді елементи гамільтонової матриці H_{ij} вигляду (14.18) приймають вигляд

$$\begin{cases} H_{11} = \mathcal{E}_0 - \mu_B B \cos \Theta \\ H_{12} = -\mu_B B \sin \Theta (\cos \varphi - i \sin \varphi) = -\mu_B B \sin \Theta e^{-i\varphi} \end{cases} \quad (14.21)$$

Тому, згідно (14.8)

$$\frac{a_{I,I}}{a_{II,I}} = \frac{H_{12}}{\mathcal{E}_I - H_{11}} = \frac{-\mu_B B \sin \Theta e^{-i\varphi}}{(\mathcal{E}_0 - \mu_B B) - (\mathcal{E}_0 - \mu_B B \cos \Theta)} = \frac{\sin \Theta e^{-i\varphi}}{1 - \cos \Theta} = \frac{2 \sin \frac{\Theta}{2} \cos \frac{\Theta}{2} e^{-i\varphi}}{2 \sin^2 \frac{\Theta}{2}} = \frac{\cos \frac{\Theta}{2} e^{-i\varphi}}{\sin \frac{\Theta}{2}} \quad (14.22)$$

Відповідь для амплітуд a_{ij} , що сумісна з умовою нормування (14.20), має вигляд

$$a_{I,I} = \cos \frac{\Theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}}, \quad a_{II,I} = \sin \frac{\Theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}}, \quad (14.23)$$

де множники, що залежать від φ , прийнято обирати в a_{jI} симетрично.

Оскільки з формул (14.23) залежність від магнітного поля зникла, фактично ми отримали загальний вираз для амплітуд імовірності переходів зі спінового стану $|S_{z'}, +\rangle$ у стани $|S_z, +\rangle |S_z, -\rangle$, що задаються двома приладами типу Штерна-Герлаха з осями Z' і Z .

Для зіставлення з дослідом слід трошки змінити умови задачі (рис.14.2). спрямуємо магнітне поле $\vec{B} = \vec{B}_z$ вздовж осі Z і будемо вважати, що при $t = 0$ з імовірністю $|C_1(0)|^2 = 1$ спін електрона знаходиться у нестационарному базисному стані $|S_z, +\rangle$, що зафіксований віссю Z' приладу типу Штерна-Герлаха. Тим попередні стаціонарні та нестационарні базисні стани обмінюються ролями, бо амплітуда імовірності $C_1(0)$ вигляду (14.19) відноситься зараз до нестационарного базисного стану. Зміна цього стану з часом визначається формулами типу (14.5') та (14.6) з тими ж значеннями a_{Ij} вигляду (14.19), так що

$$C_1(t) = a_{I,II} e^{-i\frac{\mathcal{E}_I}{\hbar}t} + a_{I,II} e^{-i\frac{\mathcal{E}_{II}}{\hbar}t} = C'_{I,I}(t) + C'_{I,II}(t), \quad (14.24)$$

де енергії стаціонарних базисних станів $|S_z, +\rangle$ і $|S_z, -\rangle$ дорівнюють $\mathcal{E}_{I,II} = \mathcal{E}_0 \mp \mu_B B_z$, а

$$\begin{aligned} C'_{I,I}(t) &= \cos \frac{\Theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} e^{-i\frac{\mathcal{E}_I}{\hbar}t} = e^{-i\frac{\mathcal{E}_0}{\hbar}t} \cos \frac{\Theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}(\varphi - \frac{2\mu_B B_z}{\hbar}t)}, \\ C'_{I,II}(t) &= \sin \frac{\Theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} e^{-i\frac{\mathcal{E}_{II}}{\hbar}t} = e^{-i\frac{\mathcal{E}_0}{\hbar}t} \sin \frac{\Theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}(\varphi - \frac{2\mu_B B_z}{\hbar}t)}. \end{aligned} \quad (14.25)$$

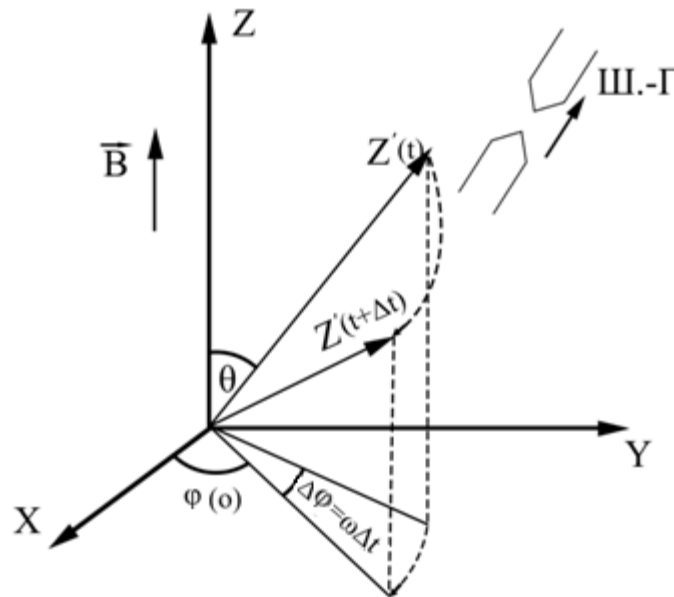


Рис.14.2

Оскільки кути Θ та φ фіксують напрямок осі Z' у реальному просторі, отриманні результати можна представити більш наочно. Неважко бачити, що кут Θ між вісями Z' та Z із часом не змінюється, а загальний множник $\exp\left\{-i\frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right\}$ ні на що впливати не може. Суттєве лише те, що обидві «проекції» стану $C_i(t)$, а це означає, і стан спіну електрона $|\Psi(t)\rangle$ в цілому залежить у будь-який момент часу t від одного і того ж, хоч і змінного азимутального кута

$$\varphi(t) = \varphi - \frac{2\mu_B B_z}{\hbar} t. \quad (14.26)$$

Така зміна кута φ з часом (при $\Theta = \text{const}$) еквівалентна рівномірному обертанню (прецесії) осі Z' і зв'язаного з нею приладу типу Штерна-Герлаха навколо осі Z . Величина

$$\omega_L = \frac{2\mu_B B_z}{\hbar} \quad (14.27)$$

має назву частоти лармарової прецесії. Інакше кажучи, стан спіну електрона $|\Psi(t)\rangle$, що жорстко «зв'язаний» з віссю Z' при $t = 0$ процесує разом з нею навколо напрямку магнітного поля $\vec{B} = \vec{B}_z$.

Відомо, що взаємозв'язок квантової і класичної динаміки виявляється в тому, що середні значення квантових динамічних величин підкоряються законам класичної динаміки (див. теореми Еренфеста).

Щоб переконатися у цьому, розглянемо коротко зміну середнього значення $\langle \vec{\mu} \rangle$ вектора магнітного моменту електрона у магнітному полі з часом. У базисному стані спіну електрона $|S_{z'}, +\rangle$ середнє значення вектора магнітного моменту, дорівнює

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \langle \mu_{x'} \rangle + \langle \mu_{y'} \rangle + \langle \mu_{z'} \rangle = \langle \mu_{z'} \rangle = \mu_{z'} \quad (14.28)$$

оскільки $\langle \mu_{x'} \rangle = \langle \mu_{y'} \rangle = 0$, а щодо компоненти $\mu_{z'}$, то середнє і власне значення співпадають. Це співвідношення на протязі часу не змінюється, оскільки середній вектор магнітного моменту $\langle \vec{\mu} \rangle$ у будь-який у будь-який момент часу орієнтований вздовж осі Z' і залишається постійним за величиною. А з того, що при цьому напрямок осі Z' змінюється, витікає, що зміна вектора $\langle \vec{\mu} \rangle$ з часом описується рівнянням прецесії, що має вигляд

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{\mu} \rangle = [\vec{\omega} \langle \vec{\mu} \rangle], \quad (14.29)$$

де кутова швидкість процесії $\vec{\omega} = -\omega_L \mathbf{e}_z$ визначається (14.27). Неважко бачити, що рівняння (14.29) співпадає з рівнянням прецесії гіроскопу у класичній динаміці при наявності зовнішнього впливу. Саме так у класичній динаміці поводить себе в магнітному полі магнітний момент $\vec{\mu}$ (наприклад, виток зі струмом). За для того щоб підкреслити цю схожість, перетворимо вираз для лармарової частоти ω_L , підставивши у нього явний вираз для μ_B :

$$\omega_L = \frac{2\mu_B B_z}{\hbar} = \frac{2B_z}{\hbar} \frac{e\hbar}{2mc} = \frac{eB_z}{mc} \quad (14.30)$$

Як і слід було чекати, постійна Планка з (14.30) зникла, завдяки чому ми одержали відомий вираз для кутової швидкості прецесії магнітного моменту $\vec{\mu}$ у полі $\vec{B}$.

Більш детальний аналіз переходів під дією постійного, а також змінного збурення, переходів в умовах резонансу тощо див. [1,3-5].

В цій главі ми повністю передруковуємо главу 7 [6], оскільки [6] зараз малодоступна для нашого читача, а стиснутий і разом з тим фізично коректний виклад цього питання може, на наш погляд, бути корисним. Ми виходимо з того, що читач володіє основами електронної теорії твердого тіла, зокрема її квантовим аспектом, і легко орієнтується в таких поняттях, як електричні зони, квазіімпульс, ефективна маса тощо.

Особливі властивості речовини при наднизьких температурах мають назву надпровідність і надтекучість. Обидва ці явища мають загальну фізичну природу, і в них проявляються квантові властивості на макроскопічному рівні. Не тільки чисто теоретичні міркування викликають інтерес до цих явищ, але і прикладне значення надпровідності.

Початок у довгому ланцюзі досліджень, які привели до сучасного стану фізики низьких температур, поклали роботи Фарадея в першій половині 19 століття. Однак ряд газів (серед них азот, водень, кисень) не вдавалося скраплювати за допомогою методів, запропонованих Фарадеем. Відкриття в 1853 році ефекту Джоуля-Томсона дозволило зробити новий крок в одержанні низьких температур, і в 1895 році на його основі був створений промисловий пристрій для одержання рідкого повітря (Лінде), в 1898 році був отриманий рідкий водень (Льюар), і нарешті, в 1908 році при атмосферному тиску був одержаний зріджений гелій (Камерлінг-Оннес). Його температура скраплення 4,2 К. Згодом температури порядку декількох абсолютних градусів були названі гелієвими. Створення гелієвих температур привело до двох важливих відкриттів – надпровідності й надтекучості.

15.1. Основні експериментальні факти

Явище надпровідності було відкрито в 1911 році тим же голландським вченим Г. Камерлінг-Оннесом, що за кілька років до цього одержав рідкий гелій. Цей збіг не випадковий. Камерлінг-Оннес керувався, у принципі, правильною думкою, що хаотичний тепловий рух спотворює дійсну

структуру атомів. Тому тільки при низьких температурах властивості речовини повинні проявлятися у своєму «чистому» виді. Саме ця думка й привела Камерлінг-Оннеса до дослідження провідності ртуті при гелієвих температурах, що завершилося відкриттям надпровідності. Звичайно, він не міг у той час знати, що виявлене їм явище пов'язане з дуже тонкими ефектами квантової фізики, що тільки зароджувалася. Перелічимо основні експериментальні факти цього явища.

1. При деякій температурі (під час відсутності магнітного поля) опір провідника перетворюється в нуль. Температура, при якій це відбувається, називається критичною (T_c). Для першого надпровідника – ртуті $T_c=4,2$ К. На рис. 15.1 наведений графік залежності опору від температури. Для порівняння на тім же рисунку наведена залежність опору від температури для нормального провідника.

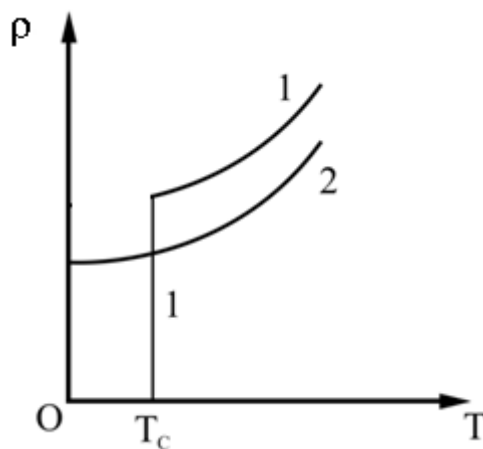


Рис.15.1. Залежність опору від температури

1 – для провідника

2 – для нормального провідника

Відомо, що при низьких температурах $\rho_{\text{ід.}} \sim T^5$, таким чином, плавно перетворюється в нуль при $T \rightarrow 0$. Особливість надпровідності полягає в тому, що при $T \neq 0$ опір стрибком перетворюється в нуль. Механізм, що у

нормальних провідників спричиняє опір, у надпровідників при $T \leq T_c$ перестає діяти. Пояснення цього факту й становить головне завдання теорії.

2. Якщо надпровідник помістити в магнітне поле, то критична температура істотно залежить від величини поля. Зі збільшенням індукції критична температура знижується. Залежність між критичною температурою (T_c) і індукцією (B_c) показана на рис. 15.2. через те, що при $T > T_c$ надпровідність зникає, можна сказати, що для кожного T_c існує поле з індукцією B_c , що руйнує надпровідний стан.

Якщо розглядати (T, B) як термодинамічні параметри, то крива, зображена на рис. 15.2 відокремлює область надпровідних станів (S) від області нормальних станів (N)

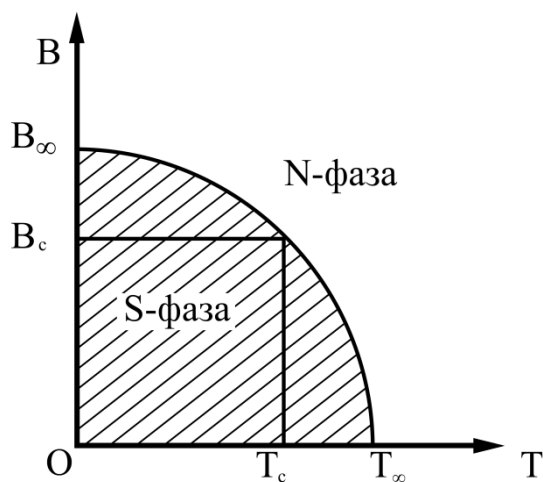


Рис. 15.2. Залежність між критичною температурою T_c і індукцією магнітного поля B_c , що руйнує надпровідність

Впадає в око подібність кривої $B_c(T_c)$ із залежністю намагнічування феромагнетиків від температури.

Ця подібність не випадкова і говорить про те, що з погляду термодинаміки, перехід з нормального стану в надпровідний є фазовим переходом 2-го роду. У фазових переходах другого роду ми зустрічаємося із процесами впорядкування. Наприклад, у феромагнетиках ця впорядкованість полягає в переважній орієнтації спінів. Нам необхідно з'ясувати, які процеси

впорядкування відбуваються в надпровідниках і яка їхня мікроскопічна природа. У цьому, по суті, і полягає квантова теорія надпровідності.

3. З описаними вище явищем тісно зв'язаний так званий ефект Мейсснера-Оксенфельда. Він полягає в наступному.

Помістимо в магнітне поле надпровідний зразок при температурі вище критичної. При такій температурі надпровідник є нормальним провідником і має слабкі магнітні властивості. Це показано схематично на рис.15.3а, де зображені магнітні силові лінії.

Будемо знижувати температуру зразка й доведемо її до температури нижче критичної. У цьому випадку зразок виявиться в надпровідному стані, а магнітне поле буде виштовхнуто із провідника (15.3б). Можна привести й інші варіанти описаного вище дослідів. Наприклад, включення магнітного поля при наявності надпровідника, якщо його температура менше критичної.

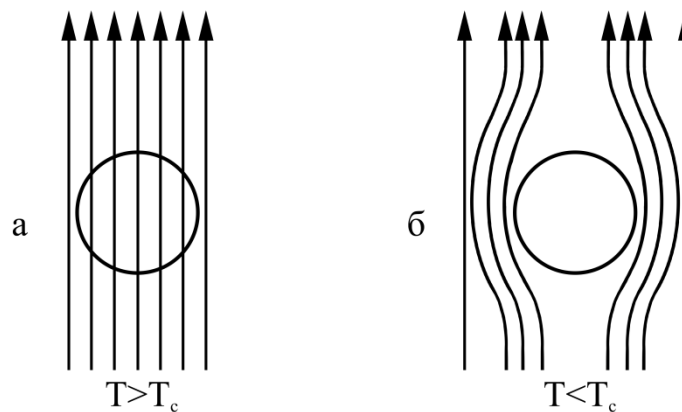


Рис.15.3 магнітні силові лінії поля, у яке внесено: а) нормальний провідник; б) надпровідник

Перетворення індукції в нуль свідчить про те, що надпровідник є ідеальним діамагнетиком. Дійсно, зі співвідношення $B = \mu H$ випливає, що ослаблення поля в діамагнетиках у порівнянні з вакуумом приводить до нерівності:

$$\mu_r < 1, \text{ де } \mu_r - \text{відносна магнітна проникність рівна } \mu_r = \frac{\mu}{\mu_0}.$$

В ідеального діамагнетика $\mu_r = 0$ і $B = 0$.

В главі 5 [6] діамagnetизм зв'язаний із явищем електромагнітної індукції. Такий зв'язок можна розглянути і у надпровідниках. При внесенні надпровідника в магнітне поле в поверхневому шарі виникає стаціонарний струм, магнітне поле якого повністю компенсує зовнішнє магнітне поле. У нормальних провідниках це неможливо тому, що внаслідок опору провідника струм у ньому без зовнішніх ЕРС повинен загасати. У надпровіднику опір відсутній, і для підтримки струму немає потреби в ЕРС. Та обставина, що струм, що компенсує, циркулює в поверхневому шарі, ми підтвердимо пізніше розрахунком.

4. Якщо збільшити силу струму, що циркулює по надпровіднику, то при деякій її значенні I_c надпровідність буде зруйнована. Пояснюється цей факт тим, що індукція власного магнітного поля, що обумовлена струмом, що тече по надпровіднику, перевищить критичне значення.

Зупинимось коротко на наступному питанні. Як можна експериментально встановити, що опір перетворюється в нуль?

За допомогою звичайного виміру опору можна було ще в часи Камерлінг-Оннеса стверджувати, що він не перевищує 10^{-10} Ом, що було досить. Більш переконливий доказ відсутності опору можна здійснити так: збудити в замкнутому надпровіднику (наприклад, у кільці) індукційний струм і спостерігати його магнітне поле. Такими дослідженнями вдалося показати, що індукційний струм не загасає. У перших дослідженнях перевозили надпровідне кільце з одного міста в інше, в цей час протягом 2,5 років не вдалося помітити якого-небудь згасання.

Надпровідність, загалом кажучи, явище не рідке. Наприклад, серед чистих елементів надпровідниками є такі звичайні метали, як Al ($T_c=1,196$ К), Pb ($T_c=7,19$ К), Zn ($T_c=0,875$ К), Nb ($T_c=9,26$ К). Надпровідність спостерігається й у напівпровідниках, а останнім часом вона виявлена і в органічних сполуках. Особливо багато надпровідників серед сполук і сплавів (число надпровідних сплавів перевалило за тисячу). Найвищі критичні

температури спостерігаються у сплавах і сполуках ніобію. Наприклад, у сплаві $Nb-Al-Ge$ $T_c=21$ К, а у сполуки Nb_3Ge $T_c=23,2$ К.

15.2. Електродинаміка надпровідників

Електромагнітне поле в середовищі визначається рівняннями Максвелла і зв'язком векторів поля $\vec{E}$ і $\vec{B}$ із середовищем. У цей зв'язок входять константи, що характеризують електричні й магнітні властивості середовища. У число матеріальних рівнянь входить і закон Ома в диференціальній формі: $\vec{j} = \sigma \vec{E}$. У надпровіднику закон Ома втрачає зміст і повинен бути замінений іншими виразами, що зв'язують поле з надпровідником. Ясно, що мікроскопічна теорія надпровідності дозволяє знайти такий зв'язок, подібно тому як теорія Лоренца й квантова механіка дозволяють визначити електричні та магнітні властивості звичайних провідників. Історично, однак, цей зв'язок був передбачений ще до виникнення мікроскопічної теорії надпровідності. Для встановлення рівнянь поля в надпровіднику варто враховувати, що відсутність опору означає відсутність дисипації, або сили тертя. Тому під дією електричного поля електрон повинен рухатися прискорено, як у вакуумі. У нормальному провіднику він рухається з постійною середньою швидкістю, тому що опір еквівалентний силі тертя (див. гл. 2 [6]).

Запишемо рівняння руху електрона в електричному полі

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E}, \quad (15.1)$$

де e – абсолютна величина заряду електрона.

Припустимо, що поле нестационарне. Тоді його можна визначити за допомогою векторного потенціалу $\vec{A}$, як це відомо з електродинаміки:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}.$$

Рівняння руху приймає вигляд

$$\frac{m}{e} \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (15.2)$$

Неважко виразити швидкість електрона через густину електричного струму:

$$\vec{v} = -\frac{\vec{i}}{ne}.$$

Вираз (15.2) в цьому випадку дає

$$\frac{m}{ne^2} \frac{\partial \vec{i}}{\partial t} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (15.3)$$

Рівняння (15.3) узгоджується зі співвідношеннями

$$\frac{m}{ne^2} \vec{i} = -\vec{A}, \quad (15.4)$$

або

$$\vec{i} = -\lambda \vec{A}, \quad (15.5)$$

де $\lambda = \frac{ne^2}{m}.$

Можна вважати, що вираз (15.5) замінює закон Ома для надпровідників.

Взявши ротор від обох частин (15.5), знайдемо

$$\text{rot} \vec{i} = -\lambda \text{rot} \vec{A} = -\lambda \vec{B} \quad (15.6)$$

Далі скористаємось рівнянням Максвелла для магнітного поля, нехтуючи струмом зміщення (це справедливо для звичайного металу й у ще більшому ступені – для надпровідників)

$$\text{rot} \vec{B} = \mu_0 \vec{i}. \quad (15.7)$$

З (15.7) знаходимо $\text{rot} \vec{i} = \frac{1}{\mu_0} \text{rot} \text{rot} \vec{B}$, використовуємо тотожність $\text{rot} \text{rot} \vec{B} = \text{grad} \text{div} \vec{B} - \Delta \vec{B}$ і, враховуючи, що $\text{div} \vec{B} = 0$, за допомогою (15.6) одержуємо рівняння для магнітного поля у надпровіднику

$$\Delta \vec{B} = \lambda \mu_0 \vec{B} \quad (15.8)$$

Рівняння типу (15.8) має місце в електродинаміці, де воно описує скін-ефект, що полягає в концентрації струмів високої частоти у вузькому поверхневому шарі провідника. Природно, що в нашому випадку рівняння (15.8) описує аналогічне явище, але мова йтиме про магнітне поле. Ми переконаємося в цьому на простому прикладі: розглянемо напівнескінченний

надпровідник, що займає півпростір $X > 0$. Якщо магнітне поле паралельно границі розділу, то для поля усередині надпровідника з рівняння (15.8) випливає:

$$\frac{d^2 B}{dx^2} = \lambda \mu_0 B. \quad (15.9)$$

Рішення рівняння (15.9), що має фізичний сенс $\left(\lim_{n \rightarrow \infty} B(x) = 0\right)$, записується в такий спосіб:

$$B(x) = B_0 \exp(-\sqrt{\lambda \mu_0} x). \quad (15.10)$$

Останній вираз показує, що магнітне поле проникає у середину надпровідника на глибину δ , де

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{\lambda \mu_0}} \quad (15.11)$$

Вираз (15.5) і рівняння (15.8) були сформульовані в 1935 році Ф. Лондоном і Г. Лондоном. Рішення (15.10), що описує падіння поля вглиб надпровідника, приводить нас фактично до ефекту Мейснера.

15.3. Надпровідність – квантове явище

А. Модель надпровідника

Майже піввіку явище надпровідності здавалося загадковим. Тільки в 50-х роках минулого століття вдалося пояснити мікроскопічний механізм надпровідності. Виявилось, що звичайна (нерелятивістська) квантова механіка здатна пояснити це явище не гірше, ніж вона пояснює нормальну провідність. Звичайно, специфічні риси у квантовій теорії надпровідності є. Вони полягають у тім, що в ній квантові закономірності проявляються в системі часток-електронів, що має макроскопічні розміри. Іншими словами, надпровідність відноситься до макроскопічної квантової механіки. Є й інші макроскопічні квантові явища, наприклад, феромагнетизм. У теорії надпровідності зручно застосувати методи квантової теорії поля. Але основні ідеї можна зрозуміти і без цих методів.

Особливо дивною здавалася можливість протікання струму без витрати енергії (дисипації), тому що опір еквівалентний силі тертя. Але задовго до відкриття явища надпровідності фізики зштовхнулися з подібною ситуацією. Це трапилося на початку 19 століття, коли Ампер для пояснення природи магнетизму висунув гіпотезу про молекулярні струми, що не зазнають опору. Відсутність опору в молекулярних струмах у свій час здавалося сильним аргументом проти гіпотези Ампера. Поява квантової механіки підтвердила гіпотезу Ампера. У стаціонарних станах енергія постійна, а струм відмінний від нуля. Наявність стаціонарних станів впливає із квантової механіки. Саме наявність стаціонарних станів природно пояснила й досліди Франка-Герца: електрони рухаються без дисипації доти, поки їхня енергія не зрівняється з енергією збудження атома. Нарешті, з аналогічним явищем фізики зштовхнулися вивчаючи поведінку теплоємності решітки. Теплоємність перетворюється в нуль саме з тієї причини, що енергія теплового руху ($k_B T$) недостатня, щоб збудити квант енергії коливання – фонон ($k_B T < \hbar\omega$).

Від цих прикладів перейдемо до надпровідності. Опір звичайно зв'язується з розсіюванням. Для того, щоб електрон міг змінити напрямок руху (квазіімпульс, квантовою мовою), він повинен перейти в новий стан. Уявимо собі тепер таку можливість: заряджені частинки з певним імпульсом займають певний енергетичний рівень. Нехай цей рівень основний. Найближчий збуджений рівень перебуває на деякій відстані від основного, тобто енергетичний спектр дискретний. Тоді, якщо тепла енергія менш енергії збудження ΔE , перехід у новий стан неможливий, дисипація енергії відсутня, а разом з нею відсутній і опір. Це схематично показано на рис. 15.4.

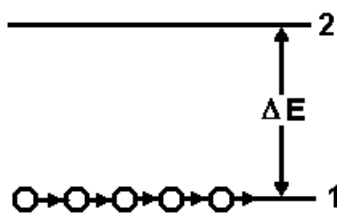


Рис.15.4. Відсутність опору, коли тепла енергія недостатня для переходу частинок у збуджений стан: 1 – основний рівень 2 – збуджений рівень

Перш ніж обговорювати реальність описаної вище моделі надпровідника, укажемо на її труднощі.

Згідно з нашою схемою на основному рівні перебуває значне число носіїв струму. Якщо ці носії звичайні електрони, то принцип Паулі забороняє зроблені припущення. адже саме із цієї причини звичайна провідність вимагає існування незаповненої зони із квазінеперервним енергетичним спектром. Нижче буде показано, як ці труднощі були переборені.

Б. Притягання між електронами

Із квантової механіки відомо, що дискретні енергетичні рівні характеризують зв'язані стани. Зв'язані стани виникають при наявності сил притягання.

Центральним пунктом у квантовій теорії надпровідності є твердження про наявність у кристалі слабких сил притягання між електронами. Перш ніж обґрунтувати це, на перший погляд, парадоксальне твердження, звернемося до одного експериментального факту, що зіграв важливу роль у теорії надпровідності.

Мова йтиме про так званий ізотопічний ефект, відкритий в 1950 році. Він полягає в наступному. Якщо у надпровідника є кілька ізотопів, то критичні температури у різних ізотопів різні. Критична температура ізотопу обернено пропорційна кореню квадратному з його маси. Якщо згадати, що за таким законом залежить від маси частота власного коливання, то стає зрозумілою думка, що виникла в ряду вчених, про те, що коливання іонів можуть відігравати істотну ролі у явищі надпровідності. Саме коливання іонів відповідальні за виникнення слабких сил притягання між електронами. До цього висновку можна прийти за допомогою простих міркувань. Розглянемо електрон, що рухається через кристалічну решітку. Поле електрона, що рухається, викличе поляризацію решітки поблизу електрона. Позитивні іони притягуються до електрона тим самим створять підвищену

густину зарядів поблизу електрона. Цей процес схематично показаний на рис. 15.5.

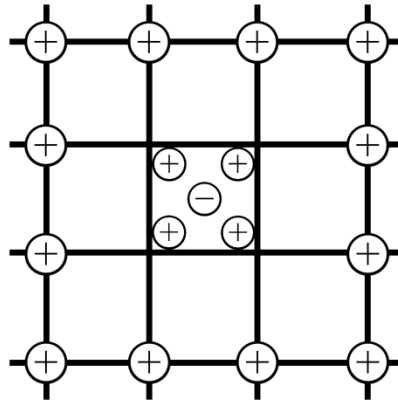


Рис. 15.5. Схематичне зображення виникнення підвищеної густини заряду навколо електрона.

Природно, що до місця з підвищеною густиною позитивних зарядів простує інший електрон. У результаті відбувається притягання електронів один до одного. Цей же процес можна пояснити мовою квантової теорії взаємодії за допомогою діаграм Фейнмана. Одна така діаграма зображена на рис. 15.6.

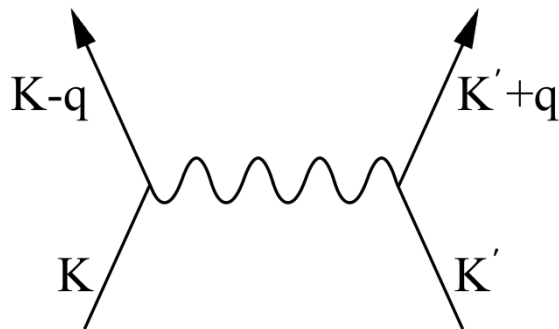


Рис.15.6. Електрон – електронна взаємодія в решітці через обмін фононом.

Електрон із квазіімпульсом k випускає фонон і переходить у стан із квазіімпульсом $k - q$, а електрон із квазіімпульсом k' поглинає фонон і переходить у стан із квазіімпульсом $k' + q$. У результаті відбулася взаємодія електронів через фонони. Але фонони – це квазічастинки, що відповідають збудженням коливань решітки. так що, по суті, і в першому й другому

поясненні мова йде про одне й те саме. Але квантова теорія взаємодії дозволяє й обчислити енергію притягання електронів, обумовлену фононним обміном.

Для розуміння фізичної сутності описаного вище притягання між електронами корисно звернутися до аналогії з фізикою атома. Валентний електрон атома літію або натрію відчуває дію одиничного заряду ядра, тому що електрони заповнених оболонок екранують ядро й нейтралізують частину його заряду. Можна сказати, що в надпровідності здійснюються крайній випадок екранування – «переекранування», тому що відштовхування переходить у притягання.

Ще один приклад екранування можна привести з фізики плазми. У цьому випадку іони, що накопичилися навколо внесеного заряду, послабляють його поле, а на деякій відстані й повністю нейтралізують. У нашому випадку відбувається не тільки нейтралізація, але й зміна знака. Це здається дивним, але ніякого протиріччя з основними законами тут немає.

В. Мікроскопічний механізм надпровідності

Тут ми покажемо, що сили притягання між електронами пов'язані з мікроскопічним механізмом надпровідності. Вкажемо, що сили притягання можуть зв'язати не тільки електронну пару, але й більше число електронів. Виникнення зв'язаної електронної пари просто більш імовірно, ніж виникнення більшого числа зв'язаних електронів. Неважко переконатися в тім, що в електронів, що входять у зв'язану пару, квазіімпульси рівні за модулем й приближені за напрямком (точніше сказати, що такий зв'язок між квазіімпульсами найбільш імовірний). Ми вже бачили, що пара утворюється в результаті взаємодії між електронами, що викликана коливаннями решітки, або, квантовою мовою, обміном фононами. При цій взаємодії виконується закон збереження імпульсу (квазіімпульсу).

Нехай $\vec{K}_1$ і $\vec{K}_2$ квазіімпульси до взаємодії (зіткнення), а $\vec{K}_1'$ і $\vec{K}_2'$ - після. Тоді $\vec{K}_1 + \vec{K}_2 = \vec{K}_1' + \vec{K}_2' = \vec{Q}$, де $\vec{Q}$ – постійний вектор.

Для того щоб зіткнення (взаємодія) відбулося, необхідно, щоб у надпровідну існували електрони із квазіімпульсами $\vec{K}_1$ і $\vec{K}_2$.

З іншого боку, стани із квазіімпульсами $\vec{K}_1'$ і $\vec{K}_2'$, у які переходять електрони після зіткнення, повинні бути вільними. Отже, взаємодіяти можуть тільки електрони, стани яких лежать поблизу поверхні Фермі. Ми будемо вважати, що вектор квазіімпульсу $\vec{K}$ повністю визначає стан, і вектор $\vec{K}$ змінюється квазінеперервно. Стан електрона визначається точкою простору квазіімпульсів. Для знаходження можливих процесів зіткнення проведемо наступну побудову. З кінців вектора $\vec{Q}$ проведемо сфери радіуса K_f (K_f – квазіімпульс Фермі). Перетинання цих сфер утворить область, загальну для двох сфер. На рис. 15.7. вона виділена.

Будь-яка точка виділеної області визначає два вектори $\vec{K}_1$ і $\vec{K}_2$ із заданим значенням суми $\vec{Q}$. Число точок у виділеній області, що задовольняють умові квазінеперервності, визначає й число можливих зіткнень, що приводить до утворення зв'язаної пари. Отже, зі збільшенням цієї області збільшується й середнє число зв'язаних пар, або імовірність утворення пари. Як видно з рисунка, виділена площа максимальна при $Q = 0$, тобто при $\vec{K}_1 = -\vec{K}_2$. Це означає, що найбільш імовірно утворення пари з рівними і протилежно спрямованими квазіімпульсами.

Так само, як у випадку молекули водню, стан пари з протилежними спінами відповідає максимальній енергії зв'язку.

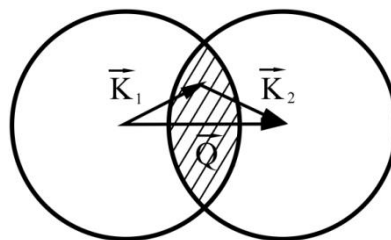


Рис. 15.7. До підрахунку імовірності виникнення зв'язаних електронних пар.

У результаті електрони, що утворюють зв'язану пару, мають протилежні імпульси й протилежні спіни.

Оцінимо середні розміри зв'язаної пари. Для цього будемо виходити зі співвідношення невизначеностей $\Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p}$ і знайдемо Δp . Скористаємося для спрощення значенням енергії вільного електрона

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

$$\text{Тоді } \Delta E = \frac{p \Delta p}{m}.$$

У силу принципу Паулі в утворенні пар можуть взяти участь тільки електрони, розташовані поблизу поверхні Фермі. Тому можна вважати, що $p \sim p_f$. З іншого боку, процеси, що цікавлять нас, відбуваються при температурі $\Delta E \sim k_B T_c$. В підсумку будемо мати

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\Delta p} = \frac{\hbar p_f}{m k_B T_c},$$

або в більш зручній для чисельності оцінки формі

$$\Delta x = \frac{2\hbar}{p_c} \sqrt{\frac{T_f}{T_c}},$$

$$\text{де } p_c = \sqrt{2mk_B T_c} \text{ і } T_f = \frac{E_f}{k_B}.$$

Вважаючи $T_c \sim 10\text{K}$, $T_f \sim 10^5\text{K}$, знаходимо $\Delta x \sim 10^{-6}\text{м}$.

З погляду мікрофізики, розміри зв'язаної пари дуже великі. Вони перетворюють борівський радіус більш, ніж в 10^4 разів, і приблизно в 100 разів перевищують середню відстань між електронами провідності в металі. Для явища надпровідності розміри пари мають істотне значення. Вони показують, що між двома зв'язаними електронами перебуває ще багато електронів. Нижче ми зрозуміємо фізичний зміст цього факту. Те, що розміри пари наближаються до макроскопічних значень, узгоджується із трактуванням надпровідності як явища макроскопічної квантової фізики.

Г. Квантомеханічний опис

Переходимо до квантово-механічного опису явища надпровідності. Нагадаємо, що у фізиці атома квантовий стан характеризується енергією системи і власною функцією. І зараз ми повинні звернутися до цих двох характеристик.

Почнемо з енергії. Ми не будемо нехтувати взаємодією між електронами, як це частино робиться в класичній теорії електронного газу і при розгляданні електронів в ідеальній решітці. Явище надпровідності саме й полягає в тім, що воно обумовлено саме взаємодією між електронами притяганням, про яке мова йшла вище. При утворенні зв'язаної пари енергія знижується на величину енергії зв'язку. Позначимо її через $\mathcal{E}$. розглянемо крайній випадок $T = 0$. Тоді слід допустити, що всі N електронів зв'яжуться в пари. Від цього енергія повинна зменшитися на величину $\frac{N}{2} \mathcal{E}$. Можна вважати число електронів парним, тому що один електрон не може змінити положення. Виходить, при $T = 0$ енергія буде менше енергії E_0 , яка відповідає наближенню незалежних електронів. Що ж відбудеться при підвищенні температури? Уже не всі електрони будуть зв'язуватися в пари, частина пар буде зруйнована тепловим рухом, і енергія підвищиться. Зв'язування електронів у пари перетворює безперервний спектр (при $T < T_c$) у дискретний, як це завжди відбувається у квантовій механіці. Проілюструємо це на рис. 15.8, де зображена залежність густини електронних станів від енергій при $T = 0$ для нормального провідника й надпровідника.

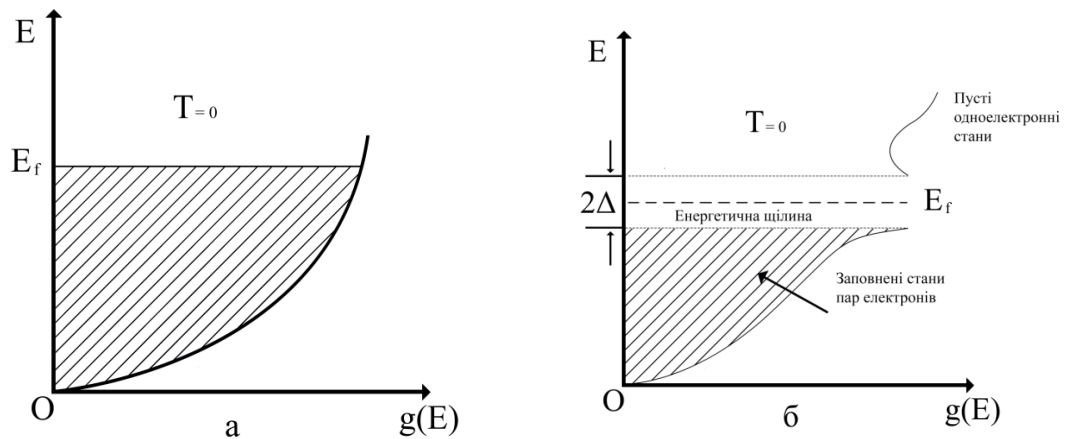


Рис.15.8. Залежність густини станів електронів від енергії в нормальному провіднику (а) і в надпровіднику (б). Заштриховані області – стани, що заповнені при температурі $T = 0$.

Ми бачимо, що в енергетичному спектрі надпровідника утворилася енергетична щілина Δ поблизу рівня Фермі. Її виникнення обумовлене зв'язуванням електронів у пари. Лише після збільшення енергії на величину Δ стає можливим поновлення безперервного енергетичного спектра. Зі збільшенням температури величина енергетичної щілини зменшується. Ми не можемо дати кількісну теорію залежності величини щілини від температури, а обмежимося тільки якісною картиною. Утворення зв'язаних пар, як ми бачили, виявляється можливим лише в результаті погодженого руху електронів і коливань іонів. Зі збільшенням температури, внаслідок збільшення хаотичності коливань ядер, можливості такого узгодження зменшуються і при критичній температурі взагалі зникають. Залежність ширини щілини від температури показана на рис. 15.9.

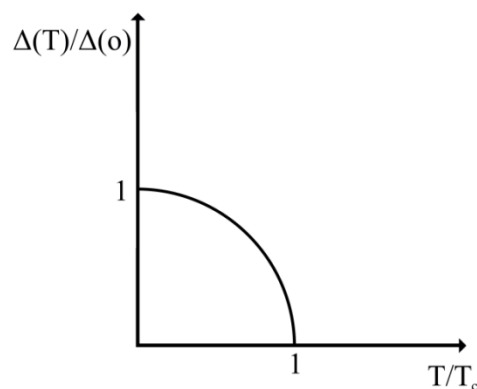


Рис. 15.9. Залежність відносної ширини енергетичної щілини від відносної температури.

Підкреслимо, що крива на рис.15.9. не тільки впливає з теорії, але й підтверджена експериментально. Ми бачимо, що залежність величини енергетичної щільності від температури має вигляд, типовий для фазових переходів другого роду. Такий вигляд має крива залежності намагніченості від температури і крива $B_c(T_c)$ на рис. 15.2.

Тепер ми можемо зрозуміти, яка величина в надпровідності відіграє роль упорядкування.

Цю роль грає число зв'язаних пар. При підвищенні температури це число знижується і перетворюється в нуль при $T = T_c$. При більш високих температурах ніякого узгодження (кореляції) між рухом окремих електронів немає – вони рухаються хаотично, і надпровідність відсутня. Надпровідність обумовлена тільки електронами зв'язаними в пари. Тому при $0 < T < T_c$ є певне число надпровідних носіїв струму й нормальних носіїв. Зі зміною температури змінюється співвідношення між цими носіями. При $T = 0$ всі носії надпровідні, а при $T \geq T_c$ – всі носії нормальні.

Уявлення про дві компоненти, надпровідну і нормальну, виникло ще до появи квантової теорії надпровідності і застосовувалося для пояснення ефекту Мейснера.

Зрівняємо модель надпровідника з тією картиною, що впливає з виникнення сил притягання. Не треба, однак, забувати, що мова йде тільки про наближену модель.

Утворення енергетичної щільності еквівалентно існуванню ізольованого рівня. Через те що електрони зв'язані в пари, у кожній парі спін цілий і вона є бозоном. Виходить, число пар (носіїв струму) на заданому рівні може бути довільним. Пари не можуть втрачати енергії доти, поки енергія теплового руху не буде достатньою, щоб зруйнувати пару, тобто відірвати електрон. Для цього тепла енергія повинна бути рівною $k_B T_c$. тоді відбувається перехід у безперервний спектр: відірвані електрони рухаються незалежно і має місце нормальна провідність.

Яке ж значення мають розміри пари?

Позначимо $|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| = r$. тоді хвильова функція кожної пари буде залежати від r .

Для простоти ми не включили індекси спінів.

Великі розміри пари означають, що $\psi(r)$ великі при $r \sim 10^{-4}$ см, або, на квантово-механічній мові, що хвильові функції окремих пар сильно перекриваються.

Мовою оптики розмір пари означає довжину когерентності, тобто довжину, на якій окремі хвилі ще можуть інтерферувати. Оскільки імпульси електронів, що входять у пари, рівні й протилежні за напрямком, сумарний імпульс пари дорівнює нулеві.

Припустимо, що під дією як завгодно слабкого поля імпульс електронів змінюється. Нехай пари утворені електронами з імпульсом $\vec{p}$ і $-\vec{p}$. Тоді при включенні поля кожний з електронів буде мати імпульс $\vec{p} + \Delta\vec{p}$, $\vec{p} - \Delta\vec{p}$ відповідно. Імпульс пари дорівнює $2\Delta\vec{p}$ незалежно від імпульсів електронів, що складають пари. Усі пари почнуть рухатися як єдине ціле з імпульсом $2\Delta\vec{p}$.

Виникнуть макроскопічний імпульс і макроскопічний струм.

Мікроскопічна теорія надпровідності була створена в 1957 році Бардіним, Купером і Шриффером. Тому зв'язані пари електронів називаються куперівськими парами.

До появи досліджень зазначених учених роль явищ була відзначена у важливій роботі Л. Д. Ландау й В. Л. Гінзбурга в 1950 році. Строга з математичної точки зору теорія надпровідності була розвинена в роботах академіка М. М. Боголюбова.

Д. Квантування магнітного потоку

Ми вже відзначали, що детальна теорія надпровідності вимагає застосування більш витонченого математичного апарату, ніж той, який ми маємо змогу використати в рамках наявного посібника. В якості деякої компенсації ми розглянемо один цікавий ефект, що підтверджує

справедливість описаних вище ідей. Цей факт називається квантуванням магнітного потоку.

З поняттям магнітного потоку ми зустрічаємося в електродинаміці, а ще частіше – електромеханіці, так що сполучення слів «магнітний потік» і «квантування» здається незвичайним. Така незвичайність пояснюється тим, що надпровідність – макроскопічне явище. Розглянемо надпровідник, що має форму циліндричного кільця. Ми вже знаємо, що суцільний надпровідник є ідеальний діамagnetик, тобто, якщо помістити його в магнітне поле, то у середині його, за винятком вузького поверхневого шару, магнітне поле буде відсутнє. Але декілька інакше виглядає справа для порожнистого надпровідника. Розглянемо два випадки.

1. Нехай магнітне поле, що паралельно осі циліндру, накладено на надпровідник, коли він знаходиться вже в надпровідниковому стані (рис.15.10 а). Тоді магнітний потік в тілі надпровідника дорівнює нулеві.

Це можна пояснити тим, що включення зовнішнього поля індукуює струми i_d , що циркулюють по зовнішній поверхні надпровідника і знищують магнітний потік у його товщі. Однак, потік, що створюють ці діамagnetні екрануючі струми, знищує також магнітний потік, що створений зовнішнім полем у запоні. Так що магнітний потік і в ній дорівнює нулеві.

2. Припустимо, що в магнітне поле поміщено надпровідник, коли він не досягнув ще надпровідного стану (тобто $T > T_c$). Тоді магнітний потік пронизує як тіло матеріалу, так і запону. Якщо тепер знизити температуру нижче критичної, то магнітне поле зникне у тілі надпровідника, але магнітний потік у запоні залишиться. Це не можна пояснити інакше, ніж появою ще одних поверхневих струмів i_p , які, на відміну від екрануючих діамagnetних струмів i_d , треба назвати парамагнетними струмами. Ці струми циркулюють по периферії запони (рис. 15.10 б).

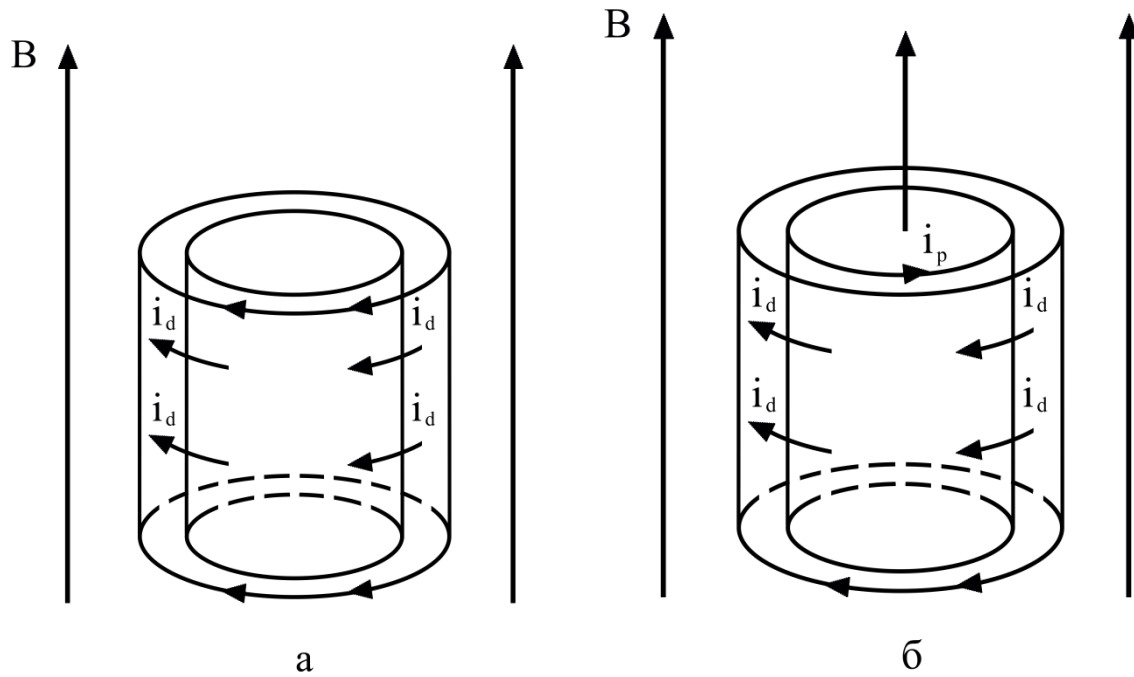


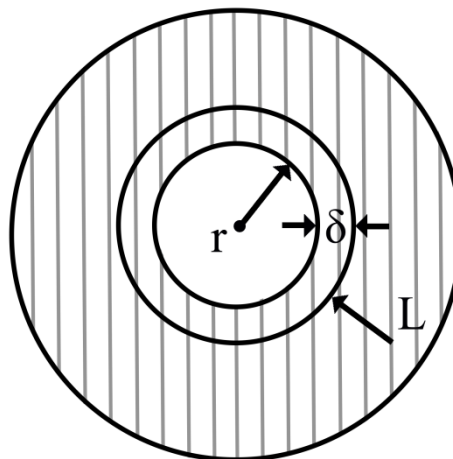
Рис.15.10. Порожнистий надпровідник:

а. магнітне поле накладене, коли матеріал знаходиться у надпровідному стані;

б. матеріал переходить у надпровідний стан, перебуваючи вже в магнітному полі.

Неважко з'ясувати на основі закону електромагнітної індукції, що при знятті зовнішнього поля магнітний потік є вмероженим у запону. Розглянемо переріз порожнистого циліндра і обчислимо магнітний потік Φ через площу отвору (рис.15.11). Для цього використаємо відому з електродинаміки тотожність

$$\int_S (\vec{B} d\vec{S}) = \oint_L (\vec{A} d\vec{L}).$$

Рис.15.11. До обчислення циркуляції $\vec{A}$

Тут циркуляція обчислюється за контуром, що обмежує площадку S . В якості такого контуру виберемо коло радіуса $r + \delta$, де r – радіус отвору, а δ – товщина поверхневого шару, по якому циркулюють струми i_p . Оскільки $\delta \ll r$, обчислювати циркуляцію можна по колу отвору, і ми отримаємо магнітний потік через площу отвору.

Для обчислення циркуляції скористаємося рівняннями Лондонів (15.4), що ми запишемо у вигляді

$$m\vec{v} = -e'\vec{A}, \quad (15.14)$$

де e' – заряд носія струму.

Тоді

$$\oint_L (\vec{A} d\vec{L}) = -\frac{1}{e'} \oint_L (\vec{p} d\vec{L}). \quad (15.15)$$

Струм у поверхневому шарі має вихровий характер, так що $\vec{p} \parallel d\vec{L}$. Тому

$$\oint_L (\vec{p} d\vec{L}) = 2\pi p r \quad (15.16)$$

Вираз (15.15) з урахуванням (15.16) дає

$$\Phi = -\frac{2\pi M}{e'}.$$

Тут M – проекція моменту імпульсу на вісь циліндра.

Відповідно до квантування моменту імпульсу

$$M_z = m_z \hbar,$$

де m_z – магнітне квантове число ($m_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

У результаті маємо

$$\Phi = -m_z \frac{h}{e'} \quad (15.17)$$

Останній вираз показує, що магнітний потік квантований і роль кванта магнітного потоку грає величина $\frac{h}{e'}$. Цей квант має назву флюксон, а квантовий магнітний потік – флюксоїд. Може викликати сумнів, що ми застосували правило квантування моменту до макроскопічного руху. Але ми поступили правильно, тому що вихровий струм у надпровіднику – макроскопічний квантовий струм. Орбіту електронів у вихрі можна

розглядати як хвильовий пакет із хвиль де Бройля. Число цих хвиль, що укладають на довжині орбіти, повинне бути цілим, аналогічно інтерференції хвиль на струні. Ця умова дає:

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = m_z; \frac{2\pi pr}{h} = m_z,$$

де m_z – ціле число, а $\lambda = \frac{h}{p}$.

Ми знову прийшли до квантування моменту.

Квантування магнітного потоку в надпровідниках було передбачено ще до виникнення квантової теорії надпровідності. Але вже після її виникнення, в 1962 році був здійснений експеримент, що підтвердив вираз (15.17). Із цього експерименту випливало що $e' = -2e$ (e – заряд електрона за модулем).

Цей експеримент (хоча він не єдиний) переконливо доводить, що носіями струму в надпровідниках є пари зв'язаних електронів.

Е. Слабка надпровідність (ефекти Джозефсона).

Переходимо до опису явищ, що виникають при контакті надпровідника з нормальним металом, або при контакті двох надпровідників. Доцільність такого розгляду можна пояснити тим, що саме з дослідження контакту двох металів почалася ера електричного струму (Вольта, 1801 р.), а дослідження контакту двох напівпровідників привело до відкриття транзисторного ефекту ($p - n$ -переходу).

При контакті двох надпровідників спостерігаються ефекти, важливі як у теоретичному відношенні, так і за їх прикладним значенням.

Почнемо з контакту надпровідника з нормальним металом. Під словом «контакт» ми розуміємо наявність тонкого шару діелектрика (товщиною порядку $10\text{\AA}$, наприклад, плівки окисла на поверхні металу), що відокремлює метал від провідника. Якщо покласти на такий контакт різницю потенціалів φ , то струм з'являється лише в тому випадку, коли φ перевищує деяку мінімальну величину, як це показано на рис. 15.12.

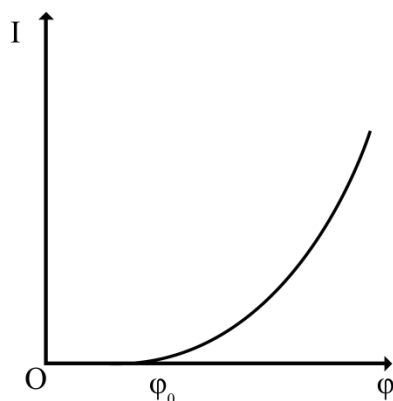


Рис.15.12. Залежність струму від різниці потенціалів на контакті надпровідник – нормальний метал.

Такий хід кривої легко пояснюється з погляду квантових уявлень про природу надпровідності. Дійсно, при такому контакті носіями струму з однієї сторони контакту є зв'язані пари в надпровіднику, а з іншого боку – електрони в нормальному полі. Перехід через діелектрик здійснюється в результаті тунельного ефекту. Але перехід пари через бар'єр малоймовірний через її велику масу. Тому пари треба попередньо зруйнувати, для чого потрібна енергія Δ . Якщо ж через бар'єр проходять електрони нормального металу, то в надпровіднику вони не можуть зв'язатися в пари, тому що всі стани з енергією, меншою Δ , уже зайняті парами. Отже, електрон попередньо повинен одержати за рахунок зовнішньої різниці потенціалів енергію Δ .

Із цих міркувань ясно, що гранична різниця потенціалів дорівнює величині щілини Δ . Виміри граничної різниці потенціалів дозволяють експериментально визначити величину енергетичної щілини.

У випадку контакту між двома різними надпровідниками спостерігаються цікаві явища, що носять назву ефектів Джозефсона, що передбачав їх в 1962 році.

Так званий стаціонарний ефект Джозефсона полягає в тому, що через контакт тече слабкий надпровідний струм і при відсутності накладеної різниці потенціалів. Ми не зуміємо дати теорію цього явища, а тільки прокоментувати його.

Відсутність ЕРС у ланцюзі з надпровідників нас не повинна дивувати, тому що зовнішня ЕРС у звичайному ланцюзі служить джерелом енергії. У надпровідниках дисипації немає, і тому немає необхідності в зовнішній ЕРС.

По суті, подібний ефект ми вже зустрічали. При розташуванні надпровідного кільця в магнітному полі виникають струми індукції в поверхневому шарі. Але якщо поле виключити, то струми залишаються, тому що загасання відсутнє.

Нестаціонарний ефект Джозефсона відбувається тоді, коли на контакт із двох надпровідників накладається постійна різниця потенціалів. У цьому випадку через контакт тече змінний струм. Якісне пояснення цього ефекту таке. При проходженні через контакт пара електронів здобуває енергію $2e\varphi$. Але в надпровіднику втрат енергії немає. Вирівнювання енергії з іншими парами надпровідника відбувається шляхом випромінювання кванта $\hbar\omega$. У силу збереження енергії $\hbar\omega = 2e\varphi$. Тобто частота змінного струму

$$\omega = \frac{2e\varphi}{\hbar} \quad (15.18)$$

З методичної точки зору корисно дати трохи інше тлумачення виразу (15.18). Звернемося до закону Фарадея

$$\mathcal{E} = -\frac{d\Phi}{dt}.$$

Величина ЕРС $\mathcal{E}$ є робота, що віднесена до одиниці заряду. З іншого боку, як ми знаємо, магнітний потік квантований. Якщо за період магнітний потік змінюється на один квант, то

$$\left| \frac{d\Phi}{dt} \right| = \frac{vh}{2e}.$$

Ми врахували значення кванта магнітного потоку.

Так як роботу виконує зовнішнє джерело, то $\mathcal{E} = \dot{\varphi}$, і ми знову приходимо до рівності

$$\varphi = \frac{vh}{2e}, \quad \omega = \frac{2e\varphi}{\hbar}.$$

Нестаціонарний ефект Джозерфсона дає спосіб перетворення постійного струму в змінний. Потрібно врахувати, що якщо робота $2e\varphi$

перевищить величину Δ , то для одного з провідників надпровідність буде зруйнована й через контакт піде нормальний постійний струм.

Явища, що спостерігаються при контакті двох надпровідників (або надпровідника з нормальним металом), одержали назву слабкої надпровідності.

До 1986 року всі відомі надпровідники характеризувалися дуже низькими значеннями T_c , і дослідження високотемпературної надпровідності багато фізиків вважали безперспективними. Однак з 1986 року почалася лавина сенсаційних відкриттів в області високотемпературної надпровідності. Автори першої роботи К. Мюллер і Ж. Беднорц виявили надпровідність в окисі міді, барію й лантану при 20 К, а потім при 30 К. Інтенсивні матеріалознавчі і хімічні дослідження в багатьох лабораторіях миру приводили до відкриття речовин з усе більш високими значеннями T_c . Незабаром П. Чу відкрив сполуку із $T_c = 93$ К й з $T_c = 120$ К. Вже на початку 1988 року П. Грант оголосив, що його група підготувала сполуку, яка вміщує талій, опір якої зникає при 125 К. Відомості, про перші роботи з високотемпературної надпровідності див. в [7].

Відкриття високотемпературної надпровідності поставило багато нових питань (і відродило інтерес до старих) як в області теоретичних, так і експериментальної фізики. У цей час ці питання широко дискутуються.

Ясно, що це відкриття ще значніше збільшило потенційні додатки надпровідності, зробивши їх практично неоглядними.

Численні приклади практичного застосування надпровідності вже в наш час можна знайти в популярних книгах та в Інтернеті.

ЗАДАЧІ ТА ВПРАВИ

1. На підставі гіпотези Планка (1.1) знайти середню енергію осцилятора на частоті ν при температурі T .

Розв'язок.

Будемо виходити з розподілу Больцмана, вважаючи енергію E випадковою величиною дискретного типу

$$E_n = n\varepsilon_0, \text{ где } \varepsilon_0 = h\nu$$

$$W_n = \frac{1}{Z} \cdot e^{-\frac{n\varepsilon_0}{kT}}$$

Статистичну суму Z знайдемо з умови нормування ймовірності $\sum W_n = 1$.

При цьому ми не зможемо виключити $n = 0$, тобто

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon_0}{kT}} = \frac{1}{1-e^{-x}}, \text{ де } x = \frac{\varepsilon_0}{kT}.$$

Таким чином,

$$\begin{aligned} \bar{E}_{\nu,T} &= \sum E_n W_n = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n\varepsilon_0 e^{-nx}}{(1-e^{-x})^{-1}} = -\varepsilon_0 \frac{\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}}{(1-e^{-x})^{-1}} \\ &= -\varepsilon_0 (1-e^{-x}) \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{1-e^{-x}} \right) = \frac{\varepsilon_0 e^{-x}}{1-e^{-x}} = \frac{\varepsilon_0}{e^x - 1}. \end{aligned}$$

Остаточно

$$\bar{E}_{\nu,T} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Цей вираз при низьких частотах ($h\nu \ll kT$) переходить до

$$\bar{E} \approx \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{kT} - 1} = kT,$$

тобто в класичну теорему про рівномірний розподіл енергії за ступенями свободи. Тому замість формули Релея-Джинса для спектрального розподілу об'ємної густини енергії випромінювання абсолютно чорного тіла

$$\rho_{\nu,T} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT$$

зараз отримуємо

$$\rho_{\nu,T} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3 \left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)}$$

формулу Планка.

2. Використовуючи результат попередньої задачі, отримати закон Стефана-Больцмана і закон зміщення Віна та обчислити константи, які фігурують у цих законах.

Відповідь: $\eta = \sigma T^4$, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{Вт} \cdot \text{м}^{-2} \text{К}^{-4}$

$$\lambda_m T = b, b = 2,89 \cdot 10^{-3} \text{м} \cdot \text{К}.$$

3. Оцінити час, за який електрон, що рухається по орбіті радіуса $r_0 = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{м}$ навколо протона в атомі водню, впав би на ядро, якщо б відповідно до класичної електродинаміки він втрачав енергію на випромінювання.

Розв'язок.

Потужність випромінювання, що генерується прискорено рухомим зарядом, відповідно до електродинаміки Максвелла, визначається формулою

$$\frac{dE_{\text{вип.}}}{dt} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{r}^2$$

Відповідно до закону збереження енергії потрібно вважати, що таку енергію щосекундно втрачає заряд (у нашому випадку електрон), тобто

$$\frac{dE}{dt} = - \frac{2}{3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{r}^2 \quad (1)$$

Будемо для простоти вважати, що в кожен момент часу прискорення електрона лише нормальне і визначається безперервно мінливим радіусом орбіти і швидкістю на ній.

Повна енергія електрона на орбіті

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2)$$

Так як

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (3)$$

$$a_n = \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2} \quad (4)$$

з (2) та (3) отримаємо

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}, \quad dE = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r^2} dr. \quad (5)$$

Підставляючи (4) та (5) в (1), отримуємо після інтегрування в інтервалі $r = (r_0, 0)$

$$\tau = \frac{4\pi^2 \epsilon_0^2 m^2 c^3 r_0^3}{e^4} \approx 10^{-10} \text{ с.}$$

4. Виходячи із законів збереження енергії та імпульсу, показати, що вільний електрон: а) не може поглинути квант, а може тільки розсіяти його; б) не може випромінювати енергію.

Розв'язок.

а) У разі повного поглинання кванта закони збереження енергії та імпульсу мали б вигляд

$$\begin{cases} m_0 c^2 + \hbar\omega = m c^2 \\ m v = \hbar k, \end{cases} \quad \text{де } m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}$$

Вирішуючи систему рівнянь, отримаємо $\beta=0$ або $\beta=1$, що в обох випадках не має фізичного сенсу.

б) У системі відліку, яка пов'язана з вільним електроном, вся енергія дорівнює $m_0 c^2$. У цій же системі закон збереження енергії потрібно записати так:

$$m_0 c^2 = m c^2 + \hbar\omega,$$

що видається абсурдним, оскільки $m > m_0$.

5. Виходячи з корпускулярних уявлень, показати, що тиск теплового випромінювання на стінки порожнини дорівнює $\frac{1}{3}$ об'ємної густини енергії випромінювання.

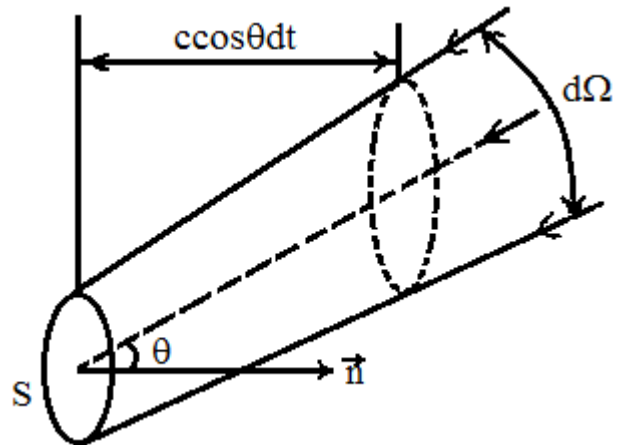


Рисунок до задачі 5

Розв'язок.

Нехай S – одинична площадка, а $\vec{n}$ – орт нормалі до неї. Число квантів, які падають за час dt на цю площадку в заданому напрямку θ і мають частоту в інтервалі $\omega, \omega + d\omega$, дорівнює

$$dn_{\omega} c \cdot \cos\theta \cdot \frac{d\Omega}{4\pi} dt, \quad (*)$$

де dn_{ω} – число квантів з частотою $\omega, \omega + d\omega$ в одиниці об'єму.

$$dn_{\omega} = \frac{u_{\omega} d\omega}{\hbar\omega},$$

де u_{ω} – функція спектрального розподілу об'ємної густини енергії випромінювання, так що $u = \int_0^{\infty} u_{\omega} d\omega$; $\frac{d\Omega}{4\pi}$ – частка квантів з даним напрямком руху, $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ – елемент тілесного кута.

Якщо помножити (*) на нормальну складову імпульсу фотона

$$p_n = \hbar k \cos\theta = \frac{\hbar\omega}{c} \cos\theta$$

і проінтегрувати по всіх частотах і кутах, знайдемо тиск p :

$$p = 2 \int dn_{\omega} c \cos\theta \frac{d\Omega}{4\pi} p_n = \frac{2}{4\pi} \int u_{\omega} d\omega \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \cos^2\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{1}{3} u.$$

Двійка перед інтегралом враховує ту обставину, що в стані термодинамічної рівноваги на кожен квант, який впав на стінку порожнини, припадає такий же квант, випромінений в протилежному напрямку.

6. Використовуючи правило квантування Бора-Зоммерфельда (1.5), знайти закон квантування гармонійного осцилятора.

Розв'язок.

Рівняння руху лінійного гармонічного осцилятора має вигляд

$$x = A \cos\omega t. \quad (1)$$

Тому імпульс

$$p = -mA\omega \sin\omega t, \quad (2)$$

а енергія

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{m\omega^2 A^2}{2}. \quad (3)$$

Умови квантування Бора-Зоммерфельда для нашої задачі дає

$$\oint p dq = m\omega^2 A^2 \int_0^T \sin^2 \omega t dt = m\omega A^2 \int_0^{2\pi} \sin^2 \omega t d(\omega t) = nh.$$

Провівши інтегрування, отримаємо для дозволених значень A_n^2

$$A_n^2 = \frac{2n\hbar}{m\omega} \quad (4)$$

Підставив (4) в (3) отримаємо

$$E_n = n\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

7. Виходячи з формули Планка, знайти вираз, що визначає число квантів в спектральних інтервалах $(\omega, \omega + d\omega)$ і $(\lambda, \lambda + d\lambda)$.

Вказівка. Формулу Планка (див. задачу 1) представити як $\rho_{\omega,T}, \rho_{\lambda,T}$.

8. Температура абсолютно чорного тіла $T = 2000$ К. Знайти енергію квантів, число яких в одиничному частотному інтервалі спектра при даній температурі максимально.

Розв'язок.

Скористаємося відповіддю попередньої задачі (вона повинна мати вигляд

$$n_\omega d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}) \text{ і з умови максимуму } \frac{dn_\omega}{d\omega} = 0 \text{ отримаємо трансцендентне}$$

рівняння $2 - x = 2e^{-x}$, де $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$. Корінь цього рівняння знаходиться графічно та дорівнює $x_0 = 1,6$. Енергія квантів, яка відповідає цьому значенню кореня, дорівнює 0,276 еВ.

9. Показати, що максимумами функцій розподілу енергії ρ_ω та числа квантів n_ω у спектрі абсолютно чорного тіла відповідають різним частотам.

Розв'язок.

$$\text{З умови } \frac{d\rho_\omega}{d\omega} = 0 \text{ і } \frac{dn_\omega}{d\omega} = 0 \text{ знаходимо відповідно рівняння}$$

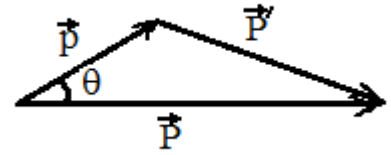
$$3 - x = 3e^{-x}$$

$$2 - x = 2e^{-x},$$

де $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$. Корені цих рівнянь, очевидно, різні, отже, відрізняються і частоти, які відповідають максимумам функцій ρ_ω і n_ω .

10. Заряджена частинка рухається з постійною швидкістю v в середовищі з показником заломлення n . Показати, що випускання частинкою фотона з

частотою ω під деяким кутом θ , можливо тільки в тому випадку, якщо $v > c'$, де $c' = \frac{c}{n}$ – фазова швидкість світла в середовищі. Врахувати, що імпульс фотона в середовищі дорівнює $p = \frac{\hbar\omega}{c'}$ і частинка є релятивістською.



Розв'язок.

Рисунок до задачі 10

Нехай $\vec{P}$ і $\vec{P}'$ – імпульси частинки до і після випромінювання, $\vec{p}$ – імпульс фотона, E і E' – енергія частинки до і після випромінювання, ε – енергія фотона.

Закони збереження імпульсу та енергії мають такий вигляд:

$$\vec{P}' = \vec{P} - \vec{p}$$

$$E' = E - \varepsilon.$$

Якщо піднести обидві рівності до квадрата, та помножити одночасно перше на c^2 і враховуючи, що $E^2 = m_0^2 c^4 + P^2 c^2$, отримаємо

$$\begin{cases} P'^2 c^2 = P^2 c^2 - 2Ppc^2 \cos\theta + p^2 c^2 \\ m_0^2 c^4 + P'^2 c^2 = m_0^2 c^4 + P^2 c^2 - 2E\varepsilon + \varepsilon^2 \end{cases}$$

Вирішуючи цю систему з урахуванням того, що $P = \frac{Ev}{c^2}$, $p = \frac{\hbar\omega}{c'}$ і $p^2 = \frac{(\hbar\omega)^2 n^2}{c^2}$, легко отримаємо

$$\cos\theta = \frac{c'}{v} \left[1 + \frac{\hbar\omega(n^2-1)}{2E} \right].$$

Так як $\hbar\omega \ll E$, то $\cos\theta \approx \frac{c'}{v}$, звідки з необхідністю випливає $v > c'$.

11.3 теорії Бора визначити буквений вираз постійної Ридберга для воднеподібного атома та обчислити її значення для атома водню. Пояснити, чим обумовлена розбіжність експериментального і теоретичного значень цієї константи.

12. Оцінити, у скільки разів збільшиться радіус орбіти електрона у атома водню, що знаходиться в основному стані, при збудженні його квантом з енергією 12,09 eV

Відповідь: у 9 разів.

13. Виразити частоту обертання електрона навколо ядра атома водню через повну енергію електрона (вважати, що потенційна енергія дорівнює нулю на нескінченності).

Відповідь: $\omega = \frac{2|E|}{n\hbar}$, где n – номер орбіти.

14. Визначити, відповідно до теорії Бора, магнітний момент електрона, що рухається по n -орбіті атома водню. Показати, що відношення магнітного моменту до механічного постійно для всіх орбіт.

Розв'язок.

Нехай електрон рухається по круговій борівській орбіті. Напрямки руху і відповідного йому струму вказані на рисунку.

Цим напрямкам відповідають напрямки механічного $\vec{M}$ і магнітного $\vec{\mu}$ моментів.

Механічний момент, за визначенням,

$$M_n = mv_n r_n = m\omega_n r_n^2,$$

а в теорії Бора $M_n = n\hbar$, де n – номер орбіти.

Магнітний момент для кругового струму, який створюється рухомим електроном, визначається як

$$\mu_n = IS = \frac{e\omega_n}{2\pi} \pi r_n^2 = \frac{eM_n}{2m} = \frac{e\hbar}{2m} n = \mu_0 n \text{ (в СІ)}.$$

Звідси видно, що $\frac{\mu_n}{M_n} = \frac{e}{2m}$. Ця величина називається гіромагнітним відношенням, а $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m}$ – магнетон Бора.

15. Різниця в довжинах хвиль між головними лініями серій Лаймана і Бальмера в спектрі атомарного водню становить 5347 Å. Обчислити значення

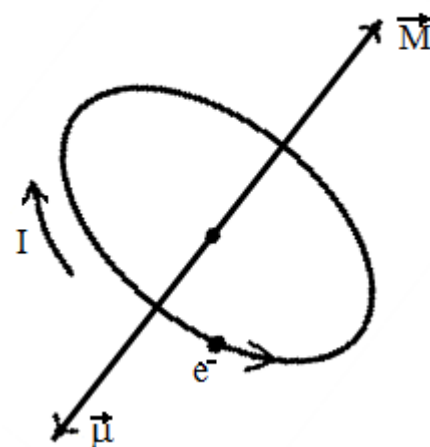


Рисунок до задачі 14

постійної Планка, вважаючи масу електрона, його заряд і швидкість світла відомими.

16. Визначити квантове число n для збудженого стану атома водню, якщо відомо, що при переході в основний стан атом випроменив два фотони з довжинами хвиль $\lambda_1=65630$ нм та $\lambda_2=12160$ нм.

Відповідь: $n=3$.

17. Обчислити потенціали іонізації і перші потенціали збудження для іонів гелію He^+ та літію Li^{++} .

Відповідь: Потенціали іонізації $V_{He^+}=54$ В, $V_{Li^{++}}=122$ В.

18. Яку довжину хвилі повинен мати фотон, щоб маса, відповідна до його енергії, дорівнювала масі спокою електрона? Якому комптонівському зміщенню відповідає така довжина хвилі?

Відповідь: $\lambda = \frac{h}{mc} = 2,426 \cdot 10^{-3}$ нм (комptonівське зміщення для 90°).

19. Порівняти енергію фотона ($\lambda = 500$ нм) з кінетичною енергією поступального руху молекули водню при кімнатній температурі.

Відповідь: Енергія фотона видимого світла $h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 4 \cdot 10^{-19}$ Дж, енергія молекули водню $\sim \frac{3}{2} kT \approx 6 \cdot 10^{-21}$ Дж.

20. Визначити максимальну швидкість фотоелектронів, що вилітають з мідного електрода, освітлюваного монохроматичним світлом з довжиною хвилі $\lambda = 250$ нм. Робота виходу електрона з міді $A = 4,17$ еВ.

Відповідь: $v_{max} = c \sqrt{\frac{2}{mc^2} \left(\frac{hc}{\lambda} - A \right)} = 527 \cdot 10^3$ м/с.

21. При освітленні поверхні деякого металу світлом з довжиною хвилі $2790 \text{ \AA}$ і $2450 \text{ \AA}$ затримуючий потенціал відповідно дорівнює $0,66$ і $1,26$ В. Визначити значення постійної Планка і роботу виходу електрона з металу.

Відповідь: $3,74$ еВ.

22. Мідну кульку, яка віддалена від інших тіл, опромінюють монохроматичним світлом довжиною хвилі $0,2$ мк. До якого максимального потенціалу зарядиться кулька, випускаючи фотоелектрони.

Відповідь: 1,73 В.

23. Довжина хвилі падаючого кванта дорівнює $0,03 \text{ \AA}$. Якої енергії набуває комптонівський електрон віддачі при розсіянні кванта під кутом 60° , 90° и 180° ?

Відповідь: $E = \frac{hc}{\lambda} \frac{2\lambda_0 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}{\lambda + 2\lambda_0 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}$, де λ_0 – комптонівська довжина хвилі електрона; 120, 185, 256 кеВ.

24. На підставі закону збереження імпульсу і формули Комптона знайти залежність між кутом розсіяння фотона і кутом, під яким відлітає електрон віддачі.

Розв'язок.

Запишемо закон збереження імпульсу в проекціях на координатні осі (див. рис.) і формулу Комптона:

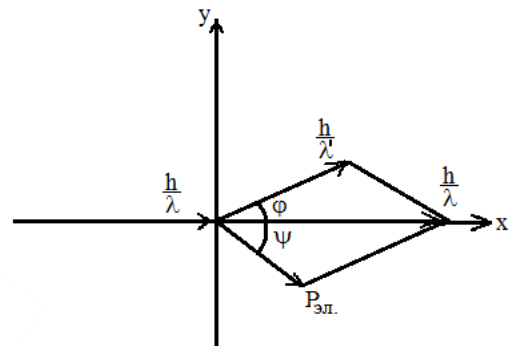


Рисунок до задачі 24

$$\begin{cases} \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \varphi + p_{\text{эл}} \cos \psi & (\text{на ось } x) \\ 0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \varphi - p_{\text{эл}} \sin \psi & (\text{на ось } y) \\ \lambda' - \lambda = 2\lambda_0 \sin^2 \frac{\varphi}{2} \end{cases}$$

Вирішуючи цю систему, легко знаходимо: $\text{tg} \psi = \frac{\text{ctg} \frac{\varphi}{2}}{1 + \frac{\lambda_0}{\lambda}}$, де $\lambda_0 = \frac{h}{mc}$.

25. Визначити кут між напрямками руху розсіяного фотона і електрона віддачі за умови, що комптонівський зсув дорівнює $0,012 \text{ \AA}$, а довжина хвилі падаючого світла $0,05 \text{ \AA}$.

Відповідь: $109^\circ 30'$.

26. Знайти довжину хвилі падаючого фотона, якщо відомо, що енергія розсіяного фотона дорівнює кінетичній енергії електрона віддачі при куті 90° між напрямками їх руху.

Відповідь: $\lambda = \frac{h}{2mc} = \frac{\lambda_0}{2} = 0,012 \text{ \AA}.$

27. Визначити дебройлівські довжини хвилі протона і електрона, кінетичні енергії яких дорівнюють середній кінетичній енергії теплового руху одноатомних молекул при кімнатній температурі?

Відповідь: $\lambda_p = 0,15 \text{ нм}; \lambda_e = 6,5 \text{ нм}.$

28. Обчислити швидкість електрона, дебройлівська довжина хвилі якого така ж, як нейтрона, що рухається з середньою тепловою енергією при температурі 0°C .

Відповідь: $4,78 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$

29. Довести, що в атомі водню і воднеподібних іонах на круговій стаціонарній борівській орбіті укладається ціле число довжин хвиль де Бройля. Визначити довжину хвилі де Бройля на круговій орбіті з головним квантовим числом n .

Розв'язок.

Квантова умова Бора (наслідок правила квантування Бора-Зоммерфельда) має вигляд:

$$mv_n r_n = n\hbar = n \frac{h}{2\pi}, \quad n - \text{номер орбіти} \quad (1)$$

З іншого боку, для електрона, що обертається по круговій орбіті, має місце (в СІ):

$$\frac{mv_n^2}{r_n} = Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (2)$$

З (1) випливає:

$$\frac{l_n}{\lambda} = n \quad (3)$$

А спільний розв'язок (1) і (2) дає

$$\lambda = \frac{2\epsilon_0 h^2 n}{m e^2 Z} = 3,32 \cdot 10^{-8} \frac{n}{Z} \text{ см} \quad (4)$$

30. Визначити кінетичну енергію електрона, при якій його дебройлівська і комптонівська довжини хвиль рівні між собою.

Відповідь: $E_{\text{кін}} = mc^2(\sqrt{2} - 1) = 0,212 \text{ MeV}, m - \text{маса спокою електрона}.$

31. Електрон, що рухається зі швидкістю $v = 6 \cdot 10^6 \text{ м/с}$, потрапляє в поздовжнє прискорювальне однорідне електричне поле напруженістю $E = 5 \text{ В/см}$. Яку відстань повинен пройти електрон вздовж силової лінії, щоб його дебройлівська довжина хвилі була $\lambda = 1 \text{ Å}$?

Відповідь: $d = \frac{h^2 - m^2 v^2 \lambda^2}{2m\lambda^2 eE} = 9,6 \text{ см.}$

32. Знайти в загальному вигляді формулу, яка виражає залежність довжини хвилі де Бройля від прискорювальної різниці потенціалів для релятивістської частинки.

Розв'язок.

Довжина хвилі де Бройля, за визначенням,

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (1)$$

Для релятивістської частинки

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (2)$$

де m_0 - маса спокою.

Пройшовши прискорювальну різницю потенціалів V , релятивістська частинка набуває кінетичної енергії

$$m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) = eV \quad (3)$$

Виражаючи з (3) $\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$, а потім v , знаходимо з (1)

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV} \sqrt{1 + \frac{eV}{2m_0 c^2}}}.$$

33. Протон з кінетичною енергією $E = 1 \text{ кеВ}$ пружно розсіюється на кут 90° ядром атома гелію, що знаходився спочатку в спокою. Визначити дебройлівську довжину розсіяного протона вдалені від атома.

Вказівка. Виходити із законів збереження енергії та імпульсу.

Відповідь: $\lambda = h \sqrt{\frac{m+M}{2m(M-m)E}} = 1,17 \cdot 10^{-2} \text{ Å,}$

де m – маса протона, M – маса ядра гелію.

34. Використовуючи функцію розподілу Максвелла для молекул ідеального газу за модулями швидкостей, знайти розподіл молекул в стані теплової рівноваги по дебройлівських довжинах хвиль. Обчислити найбільш ймовірну довжину хвилі де Бройля для молекули водню при температурі 300 К.

Розв'язок.

Функція розподілу Максвелла за модулями швидкостей має вигляд

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2.$$

Використовуючи співвідношення $f(\lambda) = f(v) \frac{dv}{d\lambda}$ и $\lambda = \frac{h}{mv}$, находимо розподіл по довжинах хвиль:

$$f(\lambda) = 4\pi h^3 (2\pi m kT)^{-\frac{3}{2}} \lambda^{-4} e^{-\frac{h^2}{2mkT\lambda^2}},$$

Досліджуючи цю функцію на екстремум $\left(\frac{df(\lambda)}{d\lambda} = 0 \right)$, отримаємо

$$\lambda_w = \frac{h}{2\sqrt{mkT}} = 0,09 \text{ нм.}$$

35. Знайти вираз для показника заломлення електронних хвиль через внутрішній потенціал кристала V_0 та кінетичну енергію електрона ε .

Розв'язок.

Для показника заломлення запишемо

$$n = \frac{\lambda_0}{\lambda'}, \quad (1)$$

де λ_0 и λ' – дебройлівські довжини хвиль електрона у вакуумі та в кристалі відповідно

$$\lambda_0 = \frac{h}{mv_0}, \quad \lambda' = \frac{h}{mv'}, \quad (2)$$

Для швидкостей v_0 и v' отримаємо з енергетичних співвідношень

$$v_0 = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}, \quad v' = \sqrt{\frac{2(\varepsilon + U_0)}{m}}, \quad (3)$$

де $U_0 = eV_0$ – енергія зв'язку електрона у кристалі (робота виходу). З (1) – (3) випливає

$$n = \sqrt{\frac{\varepsilon + U_0}{\varepsilon}}.$$

Якщо швидкість v_0 придбана електроном в результаті проходження ним різниці потенціалів V , то $\varepsilon = eV$ та

$$n = \sqrt{1 + \frac{V_0}{V}}.$$

36. Показник заломлення деякого металу відносно вакууму для електронних хвиль з енергією 200 еВ дорівнює 1,03. Визначити внутрішній потенціал металу.

Відповідь: 12 В.

37. Показати, що невизначеність в імпульсі електрона на борівській орбіті такого ж порядку, як і сам імпульс. (Пояснити попередньо, з яких міркувань випливає, що невизначеність радіуса борівської орбіти, на якій знаходиться електрон, такого ж порядку, як сам радіус).

38. Виходячи із співвідношення невизначеностей, оцінити мінімальну можливу енергію лінійного гармонічного осцилятора.

Розв'язок.

Енергія осцилятора визначається наступним виразом

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (1)$$

де ω - циклічна частота осцилятора.

Беручи до уваги, що співвідношення невизначеностей для осцилятора може бути записано у вигляді

$$p \sim \frac{\hbar}{2x}, \quad (2)$$

отримаємо, підставляючи (2) в (1)

$$E \sim \frac{\hbar^2}{8mx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

З умови $\frac{dE}{dx} = 0$ легко знаходимо

$$E_{min} = \frac{\hbar\omega}{2},$$

що точно узгоджується з теорією квантового гармонічного осцилятора.

39. Мікрочастинка з масою m рухається в потенційній ямі виду $U = \alpha|x|^3$. Оцінити на основі співвідношення невизначеностей лінійний розмір області, в якій може перебувати частинка при мінімально можливій енергії.

Розв'язок.

Співвідношення невизначеностей для частинки в ямі, як і в попередній задачі (слід пам'ятати, що осцилятор - це частинка, що знаходиться в потенційній ямі виду $U = \frac{kx^2}{2}$), запишемо у вигляді

$$p \sim \frac{\hbar}{2|x|}.$$

Тоді для енергії отримаємо

$$E = \frac{p^2}{2m} + \alpha|x|^3 \sim \frac{\hbar^2}{8m|x|^2} + \alpha|x|^3.$$

Умова $\frac{dE}{d|x|} = 0$ приводить до

$$\Delta x \sim 2|x| = \sqrt[5]{\frac{8\hbar^2}{3m\alpha}}.$$

40. Оцінити на основі співвідношення невизначеностей мінімальну енергію електрона в атомі водню.

Розв'язок.

Співвідношення невизначеностей для електрона в атомі водню, згідно задачі 37, можна записати у вигляді

$$p \sim \frac{\hbar}{r}.$$

Тоді енергія електрона $E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$ (система СГСЕ) прийме вигляд

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}.$$

З умови $\frac{dE}{dr} = 0$, отримаємо $r_{min} = \frac{\hbar^2}{me^2}$ та $E_{min} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13,5 \text{ эВ}$.

(Порівняйте з результатами теорії Бора).

41. Користуючись співвідношенням невизначеностей, оцінити мінімальну енергію атома гелію.

Відповідь: $E \sim -\frac{me^4(4Z-1)^2}{16\hbar^2}$, при $Z = 2$ $E \approx -83,5 \text{ эВ}$.

42. Положення центру кульки масою 1 г і положення електрона визначені з помилкою $\Delta x \sim 10^{-5}$ см. Яка невизначеність у швидкості Δv_x для кульки і електрона.

Розв'язок.

Скористаємося співвідношенням невизначеності у вигляді $\Delta v_x \sim \frac{h}{m\Delta x}$. Тоді для кульки $\Delta v_x \sim 10^{-21}$ см/с, для електрона $\Delta v_x \sim 10^{10}$ м/с. Звідси видно, що з високим ступенем точності можна говорити про рух кульки по класичній траєкторії, а для електрона – не можна.

43. Середній час життя атома у збудженому стані становить близько $\Delta t \sim 10^{-8}$ с. При переході атома в нормальний стан випускається фотон, середня довжина хвилі якого дорівнює $\lambda = 500$ нм. Оцінити ширину $\Delta\lambda$ і відносну ширину $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ випромінюваної спектральної лінії, якщо не відбувається її розширення за рахунок інших процесів. (Така ширина називається природною шириною спектральної лінії).

Розв'язок.

Між часом життя системи у збудженому стані Δt і невизначеністю в її енергії ΔE існує співвідношення невизначеностей

$$\Delta E \Delta t \sim h$$

$$\text{Так як } E = \frac{hc}{\lambda}, \text{ то } \Delta E = \left| -\frac{hc}{\lambda^2} \right| \Delta\lambda.$$

Таким чином,

$$\Delta\lambda \sim \frac{\lambda^2}{c\Delta t} \sim 10^{-4} \text{ нм}; \quad \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \sim \frac{\lambda}{c\Delta t} \sim 10^{-7}.$$

44. Показати, ґрунтуючись на (3.3), що оператор компоненти імпульсу $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ є ермітовим.

45. Знайти результат дії операторів $\frac{d^2}{dx^2} x^2$ і $\left(\frac{d}{dx} x\right)^2$ на функції:

а) $\sin x$, б) e^{2x}

Розв'язок.

$$\begin{aligned} \text{а)} \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} x^2\right) \sin x &= \frac{d^2}{dx^2} (x^2 \sin x) = \frac{d}{dx} (2x \sin x + x^2 \cos x) = 2 \sin x + \\ &+ 2x \cos x + 2x \cos x - x^2 \sin x = (2 - x^2) \sin x + 4x \cos x; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dx} x\right)^2 \sin x &= \left(\frac{d}{dx} x\right) \frac{d}{dx} (x \sin x) = \left(\frac{d}{dx} x\right) (\sin x + x \cos x) = \frac{d}{dx} (x \sin x + \\ &+ x^2 \cos x) = \sin x + x \cos x + 2x \cos x - x^2 \sin x = (1 - x^2) \sin x + 3x \cos x. \end{aligned}$$

$$\text{б)} \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} x^2\right) e^{2x} = 2(1 + 4x + 2x^2) e^{2x};$$

$$\left(\frac{d}{dx} x\right)^2 e^{2x} = (1 + 6x + 4x^2) e^{2x}.$$

46. Знайти комутаційні співвідношення між операторами координат і операторами компонент імпульсу (комутаційні співвідношення Гейзенберга).

Розв'язок.

Нехай $\psi(x, y, z)$ – хвильова функція. Тоді маємо

$$x(\hat{p}_x \psi) = x \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\hat{p}_x(x\psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} - i\hbar \psi \quad (2)$$

Віднімаючи (2) з (1), отримуємо

$$(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\psi = i\hbar \psi,$$

$$\text{тобто} \quad x\hat{p}_x - \hat{p}_x x = i\hbar \quad (3)$$

$$\text{аналогічно} \quad y\hat{p}_y - \hat{p}_y y = i\hbar \quad (4)$$

$$z\hat{p}_z - \hat{p}_z z = i\hbar. \quad (5)$$

Так само переконуємось, що

$$x\hat{p}_y - \hat{p}_y x = 0 \quad (6)$$

$$y\hat{p}_z - \hat{p}_z y = 0 \quad (7)$$

$$z\hat{p}_y - \hat{p}_y z = 0 \quad (8)$$

і т.д.

47. Нехай оператор $\hat{K}$ є оператор комплексного спряження. Показати, що $\hat{K}$ не є лінійним.

Розв'язок.

Виходячи з умови задачі, маємо

$$\hat{K}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = a_1^*\psi_1^* + a_2^*\psi_2^* = a_1^*\hat{K}\psi_1 + a_2^*\hat{K}\psi_2 \neq a_1\hat{K}\psi_1 + a_2\hat{K}\psi_2,$$

це означає, що оператор $\hat{K}$ не є лінійним.

48. Знайти комутаційні співвідношення для операторів компонент кінетичного моменту.

Розв'язок.

Обчислимо, наприклад, комутатор $[\hat{M}_y, \hat{M}_z] = \hat{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y$. Замість $\hat{M}_y$ і $\hat{M}_z$ будемо підставляти їх вирази з (3.16). Знайдемо спочатку $\hat{M}_y\hat{M}_z$; враховуючи при цьому результат задачі 46.

$$\begin{aligned}\hat{M}_y\hat{M}_z &= (\hat{p}_zx - \hat{p}_xz)(\hat{p}_xy - \hat{p}_yx) = \hat{p}_zx\hat{p}_xy - \hat{p}_xz\hat{p}_xy - \hat{p}_zx\hat{p}_yx + \\ &\hat{p}_xz\hat{p}_yx = y\hat{p}_zx\hat{p}_x - zy\hat{p}_x^2 - x^2\hat{p}_z\hat{p}_y + z\hat{p}_y\hat{p}_xx.\end{aligned}$$

Подібним чином

$$\hat{M}_z\hat{M}_y = y\hat{p}_z\hat{p}_xx - zy\hat{p}_x^2 - x^2\hat{p}_z\hat{p}_y + z\hat{p}_yx\hat{p}_x.$$

Віднімаючи з першої рівності другу, знайдемо

$$\hat{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y = y\hat{p}_z(x\hat{p}_x - \hat{p}_xx) + z\hat{p}_y(\hat{p}_xx - x\hat{p}_x).$$

На підставі (3) задачі 46 і (3.16) отримуємо

$$\hat{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y = i\hbar(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = i\hbar\hat{M}_x.$$

Точно також

$$\begin{aligned}\hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z &= i\hbar\hat{M}_y \\ \hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x &= i\hbar\hat{M}_z.\end{aligned}$$

Можна також показати, що

$$\begin{aligned}\hat{M}_x\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{M}_x &= 0 \\ \hat{M}_y\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{M}_y &= 0 \\ \hat{M}_z\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{M}_z &= 0.\end{aligned}$$

49. Виразити в сферичних координатах оператор z-компоненти кінетичного моменту.

Розв'язок.

Згідно (3.16) і (3.14)

$$\hat{M}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

Враховуючи зв'язок між декартовими і полярними координатами і комутативність операторів y , $\hat{p}_x$ и x , $\hat{p}_y$, отримаємо $\frac{\partial x}{\partial \varphi} = -y$, $\frac{\partial y}{\partial \varphi} = x$ і остаточно

$$\hat{M}_z = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

50. Показати, що оператори $\hat{M}_x$, $\hat{M}_y$ и $\hat{M}^2$ в сферичних координатах мають вигляд

$$\begin{aligned}\hat{M}_x &= i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{M}_y &= -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{M}^2 &= -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2.\end{aligned}$$

51. Показати, що власні значення та власні функції оператора $\hat{M}_z$ в сферичних координатах мають вигляд

$$\begin{aligned}M_z &= m\hbar, \\ \psi_m(\varphi) &= A \exp(im\varphi),\end{aligned}$$

де $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Знайти нормувальну константу.

Розв'язок.

Нехай M_z – власні значення оператора $\hat{M}_z$, а $\psi(\varphi)$ – його власні функції. Тоді рівняння на власні значення і власні функції оператора $\hat{M}_z$ буде мати вигляд

$$\hat{M}_z \psi(\varphi) = M_z \psi(\varphi)$$

Так як $\hat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ (див. задачу 49), маємо

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = M_z \psi$$

звідси $\psi(\varphi) = A e^{\frac{i}{\hbar} M_z \varphi}$.

З вимоги періодичності функції $\psi(\varphi)$

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi),$$

отримаємо

$$e^{\frac{2\pi i M_z}{\hbar}} = 1,$$

$$\cos \frac{2\pi M_z}{\hbar} + i \cdot \sin \frac{2\pi M_z}{\hbar} = 1, M_z = m\hbar, m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Отже, $\psi_m(\varphi) = A \exp(im\varphi)$.

З умови нормування $\int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \psi_m(\varphi) d\varphi = 1$ знайдемо

$$|A|^2 2\pi = 1, A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

52. Спростити наступні комутатори:

а) $[\hat{p}_x, f(x, y, z)]$, б) $[\hat{p}_x, x^n]$, в) $[x, \hat{T}]$, где $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ – оператор кінетичної енергії.

Відповідь: а) $[\hat{p}_x, f(x, y, z)] = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}$, б) $[\hat{p}_x, x^n] = -i\hbar n x^{n-1}$, в) $[x, \hat{T}] = 0$.

53. Визначити функцію f від оператора $\hat{A}$ за аналогією з розкладанням в ряд Тейлора цієї функції. Показати, що для оператора $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ справедлива операторна рівність

$$e^{\alpha \hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n},$$

де α – деяке число.

Розв'язок.

Функція від оператора $\hat{A}$, згідно з визначенням ряду Тейлора, повинна мати вигляд

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n.$$

Для оператора $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ розкладання експоненти в ряд у відповідності з попередньою формулою слід записати у вигляді

$$e^{\alpha \hat{A}} = 1 + \alpha \hat{A} + \frac{\alpha^2}{2!} \hat{A}^2 + \dots + \frac{\alpha^n}{n!} \hat{A}^n = 1 + \alpha \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\alpha^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n}.$$

54. Показати, що для будь-якого оператора $\hat{\sigma}$, квадрат якого дорівнює одиниці ($\hat{\sigma}^2 = 1$), справедливе співвідношення

$$\sigma^{i\theta \hat{\sigma}} = \cos \theta + i \hat{\sigma} \sin \theta,$$

де θ – деяке дійсне число.

Вказівка.

Скористатися результатом попередньої задачі і формулами розкладання в ряд тригонометричних функцій

$$\sin \theta = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\theta^{2n+1}}{(2n+1)!},$$

$$\cos \theta = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\theta^{2n}}{(2n)!}.$$

55. При якому співвідношенні між ермітовими операторами $\hat{A}$ і $\hat{B}$ їх добуток буде ермітовим оператором?

Розв'язок.

Нехай оператор $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, де $\hat{A}$ і $\hat{B}$ – ермітові оператори, буде також ермітовим оператором. Тоді повинна виконуватися рівність

$$\int \psi^* (\hat{A}\hat{B}) \psi dx = \int \psi (\hat{A}\hat{B})^* \psi^* dx, \quad (1)$$

а в силу ермітовості операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ (1) можна переписати у вигляді

$$\int \hat{B} \psi \hat{A}^* \psi^* dx = \int \hat{B}^* \psi^* \hat{A} \psi dx \quad (2)$$

Якщо у припущенні ермітовості оператора $\hat{A}\hat{B}$ справедливність рівності (1) очевидна, то справедливність рівності (2) може бути досягнута тільки у разі заміни в правій частині цієї рівності $\hat{B}$ на $\hat{A}$ і навпаки. Тобто рівність (1) потрібно переписати у вигляді

$$\int \psi^* (\hat{A}\hat{B}) \psi dx = \int \psi^* (\hat{B}\hat{A}) \psi dx = \int \psi (\hat{B}\hat{A})^* \psi^* dx \quad (3)$$

Тоді наслідком ермітовості операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ буде

$$\int \hat{B} \psi \hat{A}^* \psi^* dx = \int \hat{A}^* \psi^* \hat{B} \psi dx, \quad (4)$$

что сумісно з (3).

Таким чином, ермітовість операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ забезпечить ермітовість їх добутку $\hat{A}\hat{B}$ при умові $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

56. Оператор $\hat{A}$ комутує з операторами $\hat{B}$ і $\hat{C}$. Чи можна звідси зробити висновок, що оператори $\hat{B}$ і $\hat{C}$ комутативні?

Відповідь: В загальному випадку ні.

57. Довести, що якщо оператори $\hat{A}$ і $\hat{B}$ ермітові і некомутовуючі, то:

а) $[\hat{A}, \hat{B}]$ – неермітовий оператор; б) $i[\hat{A}, \hat{B}]$ – ермітовий оператор.

58. Знайти власні функції і власні значення операторів:

- а) $-i \frac{d}{dx}$, якщо $\psi(x) = \psi(x + a)$, де a – стала величина;
 б) $-\frac{d^2}{dx^2}$, якщо $\psi(0) = 0$ і $\psi(l) = 0$.

Розв'язок.

а) Рівняння на власні функції і власні значення має для оператора а) вид

$$-i \frac{d\psi(x)}{dx} = \lambda\psi(x), \text{ тобто } \frac{d\psi}{\psi} = i\lambda dx.$$

Звідси $\psi(x) = Ce^{i\lambda x}$, при цьому, згідно умови,

$$Ce^{i\lambda x} = Ce^{i\lambda(x+a)}.$$

Таким чином, $\lambda a = 2\pi n$, і, отже, $\lambda_n = \frac{2\pi}{a}n$, ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)

б) Для оператора б) маємо рівняння

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} = \lambda\psi.$$

Його розв'язок $\psi = C_1 \sin\sqrt{\lambda}x + C_2 \cos\sqrt{\lambda}x$.

Граничні умови дають:

$$\psi(0) = C_2 = 0; \psi(l) = C_1 \sin\sqrt{\lambda}l = 0$$

$$\text{Звідси } \sqrt{\lambda}l = n\pi, n = \pm 1, \pm 2, \dots; \sqrt{\lambda} = \frac{n\pi}{l}.$$

Власні функції

$$\psi_n(x) = C_1 \sin\sqrt{\lambda}x = C_1 \sin \frac{n\pi x}{l},$$

а власні значення оператора

$$\lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{l^2}.$$

59. Беручи до уваги рівноправність координатних осей, а значить, і рівноправність проекцій моменту імпульсу на ці осі, показати, що в стані з певним значенням l (орбітального квантового числа) середнє значення квадрата моменту імпульсу дорівнює $\overline{M^2} = \hbar^2 l(l+1)$.

Розв'язок.

Рівноправність координатних осей дозволяє записати

$$\overline{M^2} = \overline{M_x^2} + \overline{M_y^2} + \overline{M_z^2} = 3\overline{M_z^2}.$$

В задачі 51 показано, що $M_z = m\hbar$, де $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Тому $\overline{M_z^2} = \hbar^2 \overline{m^2} = \hbar^2 \frac{\sum_{-l}^l m^2}{2l+1} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{3}$.

Отже, $\overline{M^2} = 3\overline{M_z^2} = \hbar^2 l(l+1)$.

60. Показати, що в стаціонарному стані дискретного спектру середнє значення проекції імпульсу частинки дорівнює нулю.

Розв'язок.

Розглянемо спочатку комутатор $[\hat{H}, x]$, де $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$ – гамільтоніан одновимірної стаціонарної задачі. Легко показати, що $[\hat{H}, x] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x$. Тому середнє значення проекції імпульсу частинки дорівнює

$$\overline{p_x} = \int \psi^* \hat{p}_x \psi dx = \int \psi^* \frac{im}{\hbar} (\hat{H}x - x\hat{H}) \psi dx.$$

Скористаємося тепер ермітовістю оператора $\hat{H}$. Отримаємо

$$\overline{p_x} = \frac{im}{\hbar} \int (x\psi \hat{H} \psi^* - x\psi^* \hat{H} \psi) dx = \frac{im}{\hbar} \int E(x\psi \psi^* - x\psi^* \psi) dx = 0$$

Ми врахували тут, що $\hat{H}\psi = E\psi$.

61. Визначити власні функції та спектр власних значень оператора $\hat{x}$ в імпульсному представленні.

Розв'язок.

Оператор $\hat{x}$ в імпульсному представленні має вигляд $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$. Нехай $\varphi(p_x)$ – власна функція цього оператора. Тоді

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(p_x)}{\partial p_x} = x \varphi(p_x).$$

Власні функції, що задовольняють такому рівнянню, а також стандартним умовам скінченності, однозначності і безперервності мають вигляд

$$\varphi(p_x) = C e^{-\frac{i}{\hbar} x p_x},$$

де x – будь-яке дійсне число. Таким чином, спектр власних значень $\hat{x}$ безперервний.

62. В одновимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками ($0 \leq x \leq a$) знаходиться частинка в стані $\psi(x) =$

$Ax(a-x)$. Знайти хвильову функцію в енергетичному представленні та обчислити середню енергію частинки.

Розв'язок.

З умови нормування $\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a x^2(a-x)^2 dx = 1$ знаходимо $A^2 = \frac{30}{a^5}$. Рівняння для власних функцій оператора енергії всередині ями ($U(0) = U(a) = \infty$) має вигляд

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0.$$

Це рівняння для значень $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$ має кінцеві, однозначні і безперервні рішення

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, n=1,2,3,\dots$$

Використовуючи розкладання (3.8) та визначення коефіцієнтів C_n (3.9), які суть хвильова функція $\varphi(E_n)$ в енергетичному представленні, запишемо

$$\varphi(E_n) = \int_0^a \psi(x) \psi_n^*(x) dx = A \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a x(a-x) \sin \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{4\sqrt{15}(1-(-1)^n)}{(n\pi)^3}.$$

Густина ймовірності володіння частинкою енергією E_n знаходимо за стандартною формулою для густини ймовірності

$$W(E_n) = |\varphi(E_n)|^2 = \frac{240(1-(-1)^n)^2}{(n\pi)^6}.$$

Звідси видно, що $W(E_n) \neq 0$ тільки при $n=1,3,5,\dots$

Середня енергія частинки дорівнює

$$\bar{E} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\pi^2 \hbar^2 (2k+1)^2}{2ma^2} \cdot \frac{240 \cdot 2^2}{\pi^6 (2k+1)^6} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}.$$

Примітка:

$$1 + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \frac{1}{7^4} + \dots = \frac{\pi^4}{96}.$$

63. Показати, що всі розв'язки рівняння (4.1) задовольняють деякому іншому рівнянню, яке аналогічно рівнянню безперервності в електродинаміці або механіці суцільних середовищ.

Розв'язок.

Запишемо рівняння (4.1) в розгорнутому вигляді

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t). \quad (1)$$

Зробимо комплексне спряження (1). Отримаємо

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi^*(\vec{r}, t). \quad (2)$$

Помножимо (1) на $\psi^*(\vec{r}, t)$, а (2) – на $\psi(\vec{r}, t)$ і віднімемо з першого результату другий:

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \right). \quad (3)$$

Введемо

$$W(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (4)$$

– густину розподілу координат і деякий вектор

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*). \quad (5)$$

Тоді з (3) отримаємо рівняння

$$\frac{\partial W(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div} \vec{j}(\vec{r}, t) = 0. \quad (6)$$

Оскільки $\frac{\partial W(\vec{r}, t)}{\partial t}$ є швидкість зміни густини ймовірності виявити частинку в околиці точки $\vec{r}$, то з рівняння (6) випливає, що вектор $\vec{j}(\vec{r}, t)$ має сенс густини струму ймовірності. Рівняння (6) за аналогією з відповідним класичним рівнянням називається рівнянням безперервності в квантовій механіці.

64. Показати, що з рівняння Шредінгера випливає рівність

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \psi dV = 0,$$

яка вказує на збереження нормування хвильової функції з часом.

65. Знайти загальний розв'язок часового рівняння Шредінгера для вільної частинки.

Розв'язок.

Рівняння Шредінгера для вільної частинки ($U = 0$) має вигляд

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1)$$

Це рівняння допускає поділ змінних. Тому його окремий розв'язок шукаємо у вигляді

$$\psi(x, t) = \varphi(x)f(t). \quad (2)$$

Підстановка (2) в (1) дає

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E, \quad (3)$$

де E – стала розділення.

При $|x| \rightarrow \infty$ $\varphi(x)$ буде кінцевою, якщо $E > 0$. Позначимо $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$.

З (3) отримаємо

$$f(t) = e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}, \quad \varphi(x) = e^{ikx}, \quad (4)$$

де k – будь-яке дійсне число.

Загальний розв'язок рівняння (1) прийме вигляд

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k)e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (5)$$

де $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ – частоти хвиль де Бройля.

66. Встановити зв'язок між хвильовими функціями $\psi'(x', t)$ і $\psi(x, t)$, що описують рух нерелятивістської частинки в інерціальних системах відліку K і K' , якщо відомо, що частинка рухається з постійною швидкістю у системі K , відносно якої система K' переміщається зі швидкістю v_0 . Вважати, що швидкості v і v_0 співпадають за напрямком.

Розв'язок.

Хвильова функція, що описує рух частинки в системі K' , має вигляд

$$\psi'(x', t) = Ae^{i(k'x' - \omega't)}.$$

Величини, що входять в показник експоненти, перетворимо наступним чином

$$\begin{aligned} x' &= x - v_0 t, \\ k' &= \frac{m(v - v_0)}{\hbar} = k \left(1 - \frac{v_0}{v}\right), \\ \omega' &= \frac{m(v - v_0)^2}{2\hbar} = \omega - \frac{mv_0}{2\hbar} (2v - v_0). \end{aligned}$$

Підстановка цих виразів у функцію ψ' дає

$$\psi'(x', t) = \psi(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \left(m v_0 x - \frac{m v_0^2}{2} t \right)}.$$

Легко бачити, що експоненціальний член описує рух частинки разом з системою K' відносно системи K .

67. У момент часу $t = 0$ вільна частинка описується функцією $\psi(x, 0) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + i k_0 x}$. Визначити коефіцієнт A та область локалізації частинки. Знайти густину струму ймовірності $\vec{j}$.

Розв'язок.

Нормувальний коефіцієнт A знаходимо з умови

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) \psi^*(x, 0) dx = 1.$$

Отримаємо

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = |A|^2 a \sqrt{\pi} = 1; \quad |A|^2 = \frac{1}{a \sqrt{\pi}}.$$

Область локалізації визначаємо, обчислюючи густину ймовірності:

$$W = |\psi(x, 0)|^2 = |A|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}}.$$

Ця функція має максимальне значення у точці $x = 0$ і швидко спадає при $|x| > a$. Ширина пакета, що задається такою функцією, порядку a . Густину струму ймовірності визначимо за формулою (5) зад.63. Обчислення дають

$$j_x = |A|^2 \frac{\hbar k_0}{m} e^{-\frac{x^2}{a^2}} = \frac{\hbar k_0}{m} W.$$

Кінцевий вираз для j_x співпадає з класичним; величина $\frac{\hbar k_0}{m}$ – аналог класичної швидкості частинки.

68. Перетворити рівняння Шредінгера від декартової системи координат (x, y) до полярної системи (r, φ) (плоский випадок).

Розв'язок.

У декартовій системі координат рівняння Шредінгера, яке не залежить від часу, для плоского випадку має вигляд

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

Перехід до полярної системи здійснимо, використовуючи формули перетворення координат

$$x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi, \text{ чи}$$

$$r^2 = x^2 + y^2, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x},$$

і формули перетворення похідних

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r}.$$

Після зазначених перетворень отримаємо

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

69. Як зміниться повна хвильова функція, що описує стаціонарні стани, якщо змінити рівень початку відліку енергії?

Розв'язок.

Зміна рівня початку відліку енергії означає, що потенціальна енергія всюди зміниться на деяку величину ΔU . Однак при цьому власні значення енергії, що визначаються рівнянням Шредінгера

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0,$$

зміняться на ту ж величину, тобто різниця $(E - U)$ не зміниться. Отже, вид $\psi(x, y, z)$ залишиться таким же. Зміниться лише тимчасовий множник повної хвильової функції так, що

$$\psi(x, y, z, t) = \psi_n(x, y, z) e^{-i \frac{E_n + \Delta U}{\hbar} t}.$$

Оскільки фізичний сенс має $|\psi|^2$, то, очевидно, зазначена зміна фізично ніяк не проявиться.

70. Хвильова функція частинки, що знаходиться в одномірній прямокутній потенціальній ямі шириною a з абсолютно непроникними стінками, мала в початковий момент $t = 0$ вид $\psi(x, 0) = A x(a - x)$. Знайти хвильову функцію частинки в довільний момент часу t .

Вказівка. Скористатися частково результатами розв'язку задачі 62.

Відповідь:

$$\psi(x, t) = \frac{8}{\pi^3} \sqrt{\frac{30}{a}} \sum_n \frac{1}{n^3} \sin \frac{n\pi x}{a} e^{-i\omega_n t}, \text{ де } \omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2} n^2, n = 1, 3, 5 \dots$$

71. Довести, що для частинки, яка рухається в потенціальному полі $U(x)$, виконуються операторні співвідношення:

$$\text{а) } \frac{d}{dt}(x^2) = \frac{1}{m}(x\hat{p}_x + \hat{p}_x x);$$

$$\text{б) } \frac{d}{dt}(x\hat{p}_x) = \frac{\hat{p}_x^2}{m} = x \frac{\partial U}{\partial x};$$

$$\text{в) } \frac{d}{dt}(\hat{p}_x^2) = -\left(\hat{p}_x \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial x} \hat{p}_x\right).$$

72. Гамільтоніан зарядженої частинки, що рухається в магнітному полі, має вигляд

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\vec{p}} - e\hat{\vec{A}})^2,$$

де $\hat{\vec{A}}$ – оператор вектора-потенціала магнітного поля, що являється функцією координат. Знайти оператор $\hat{\vec{v}}$ швидкості частинки в магнітному полі і правило комутації операторів різних компонент швидкості.

Відповідь:

$$\hat{\vec{v}} = \frac{1}{m} (\hat{\vec{p}} - e\hat{\vec{A}});$$

$$\hat{v}_x \hat{v}_y - \hat{v}_y \hat{v}_x = \frac{ie\hbar}{m^2} B_z;$$

$$\hat{v}_y \hat{v}_z - \hat{v}_z \hat{v}_y = \frac{ie\hbar}{m^2} B_x;$$

$$\hat{v}_z \hat{v}_x - \hat{v}_x \hat{v}_z = \frac{ie\hbar}{m^2} B_y.$$

73. Показати, що для частинки, яка знаходиться в потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками ($U(x) = \infty$ при $x = 0$ и $x = a$), мають місце співвідношення:

$$\bar{x} = \frac{1}{2}a, \overline{(x - \bar{x})^2} = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2\pi^2}\right),$$

де a – ширина ями.

74. При якій ширині одновимірної прямокутної ями з абсолютно непроникними стінками дискретність енергетичного спектра електрона і

протона вже для перших рівнів стає порівнянною, наприклад, з середньою кінетичною енергією цих частинок при кімнатній температурі (≈ 300 K)?

Відповідь: $a = \pi \hbar \sqrt{\frac{2n+1}{3mkT}}$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Для електрона $a \leq 54 \text{ \AA}$, для протона $a \leq 1,25 \text{ \AA}$.

75. Частинка з масою m може рухатися тільки по колу з радіусом r_0 в потенціальному полі, яке не залежить від азимуту φ .

а) Знайти можливі значення кінетичної енергії E і моменту імпульсу M частинки.

б) Визначити власні функції рівняння Шредінгера.

Розв'язок.

а) На підставі задачі 68 і приймаючи $U = 0$, рівняння Шредінгера для даної задачі можна записати у вигляді

$$\frac{1}{r_0^2} \frac{d^2 \psi}{d\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0.$$

Розв'язок цього рівняння запишемо у вигляді

$$\psi = a e^{ik\varphi},$$

де $k = \frac{r_0 \sqrt{2mE}}{\hbar}$. Для однозначності хвильової функції необхідно, щоб $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$, звідки $k = \pm n$, $n = 0, 1, 2, \dots$

Тому отримаємо

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mr_0^2}.$$

Можливі значення моменту імпульсу частинки

$$M_n = n\hbar.$$

б) Нормувальну сталу хвильової функції знайдемо з умови

$$\int_0^{2\pi} a^2 \sin^2(k\varphi + \alpha) d\varphi = 1,$$

звідки $a = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$, $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(n\varphi + \alpha)$, $n = 1, 2, 3, \dots$

76. Для частинки в одновимірній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками обчислити ймовірність її знаходження в області $\frac{1}{4}a \leq x \leq \frac{3}{4}a$, якщо вона володіє найменшою можливою енергією.

Визначити також число енергетичних рівнів в інтервалі $(E, E + dE)$.

Відповідь: $W\left(\frac{a}{4} \leq x \leq \frac{3}{4}a\right) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \approx 0,82$.

77. Який буде розподіл ймовірностей різних значень імпульсу частинки в одновимірній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками, якщо відомо, що частинка перебуває в n -му енергетичному стані.

Розв'язок.

Будь-який стан можна розглядати як суперпозицію хвиль де Бройля, тобто станів із заданим імпульсом частинки $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$, тобто

$$\Psi(x, y, z, t) = \iiint_{-\infty}^{\infty} \varphi(p_x, p_y, p_z, t) e^{i \frac{p_x x + p_y y + p_z z}{\hbar}} \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \quad (1)$$

Тут множник $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$ вибраний з умови нормування.

За відомою теоремою Фур'є про звернення інтеграла (1) знаходимо для кожної функції ψ амплітуду φ

$$\varphi(p_x, p_y, p_z, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, z, t) e^{-i \frac{p_x x + p_y y + p_z z}{\hbar}} dx dy dz. \quad (2)$$

Для нашого випадку

$$\varphi_n(p_x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \int_0^a \psi_n(x) e^{-i \frac{p_x x}{\hbar}} dx. \quad (3)$$

Враховуючи, що $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$, (див. (5.4)), отримаємо

$$\begin{aligned} \varphi_n(p_x) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin \frac{n\pi x}{a} e^{-i \frac{p_x x}{\hbar}} dx = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{\hbar^2 n \pi a}{(p_x^2 a^2 - \hbar^2 n^2 \pi^2)} \left(e^{-i \frac{p_x a}{\hbar}} (-1)^n - 1 \right). \end{aligned}$$

Таким чином,

$$|\varphi_n(p_x)|^2 = \frac{\pi a \hbar^3 n^2}{(p_x^2 a^2 - \hbar^2 n^2 \pi^2)^2} \left| e^{-i \frac{p_x a}{\hbar}} (-1)^n - 1 \right|^2.$$

78. Частинка рухається в потенціальній ямі (див. рис.)

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ U_0, & x \geq a \end{cases}$$

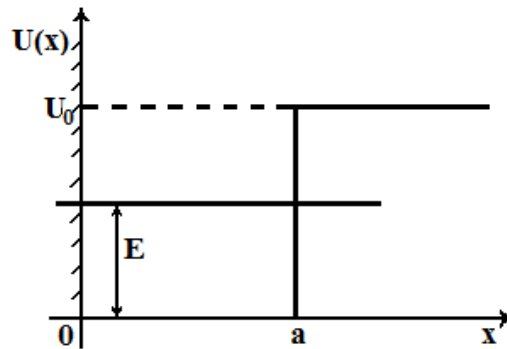


Рисунок до задачі 78

Знайти рівняння, що визначає спектр власних значень енергії частинки в області $E < U_0$. Показати графічним рішенням отриманого рівняння, що спектр енергії частинки є в даному випадку дискретним. З'ясувати за яких умов частинка взагалі не зможе перебувати в ямі.

Розв'язок.

Рівняння Шредінгера для двох областей мають вигляд

$$\begin{aligned} 0 \leq x \leq a \quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 &= 0, \\ x \geq a \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi_2 &= 0. \end{aligned}$$

Введемо позначення

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{и} \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E).$$

Тоді попередні рівняння приймуть вигляд

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 = 0, \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \kappa^2\psi_2 = 0.$$

Їх розв'язок є

$$\psi_1(x) = A \sin kx + A_1 \cos kx \quad \text{при} \quad 0 \leq x \leq a$$

$$\psi_2(x) = B e^{-\kappa x} + B_1 e^{\kappa x} \quad \text{при} \quad x \geq a$$

З граничних умов $\psi_1(0) = 0$, $\psi_2(\infty) = 0$ отримаємо $A_1 = 0$ и $B_1 = 0$.

Отже,

$$\psi_1(x) = A \sin kx,$$

$$\psi_2(x) = Be^{-\kappa x}.$$

Умови безперервності хвильової функції та її похідної в точці $x=0$

$$A \sin ka = Be^{-\kappa a}, \quad A \kappa \cos ka = -B \kappa e^{-\kappa a}.$$

Отримаємо:

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{\kappa}{k}, \quad \operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\kappa} = -\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}} \quad (1)$$

Оскільки

$$\sin ka = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{ctg}^2 ka}} = \pm \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}}} = \pm \sqrt{\frac{E}{U_0}} = \pm \frac{\hbar}{a} \frac{ka}{\sqrt{2mU_0}}, \quad (2)$$

то розв'язок задачі зводиться до розв'язку трансцендентного рівняння.

Будемо вирішувати його графічно.

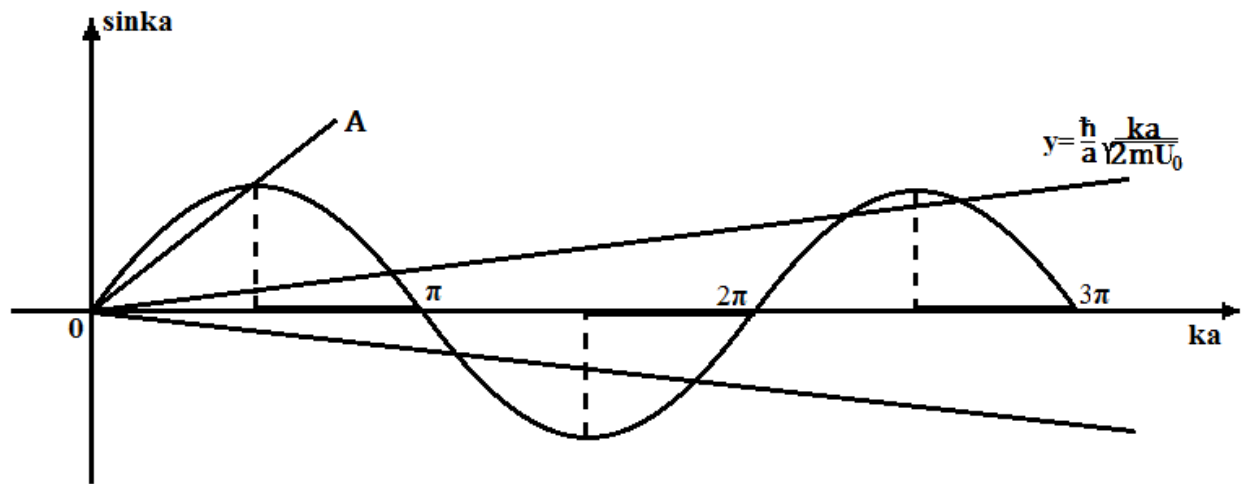


Рисунок до задачі 78

Графічний розв'язок, як видно з рисунку, дає корені, що відповідають дискретному спектру енергії. Корені рівняння відповідають тим точкам перетину, які знаходяться в парних чвертях кола (ці ділянки осі абсцис виділені на рисунку жирними відрізками). Останнє твердження легко зрозуміти з точки зору рівняння задачі у вигляді (1). Справді, перетин $\operatorname{tg} ka$ з кривою $-\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}$ можливий тільки в тих чвертях, де $\operatorname{tg} ka < 0$, тобто в парних чвертях.

Як випливає з рисунку, корені рівняння існують, якщо пряма $y = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{1}{2mU_0}} ka$ розташовується не під більшим кутом до осі абсцис, ніж пряма ОА. У цьому граничному випадку, як видно з (2), $U_0 = E$, а $\operatorname{tg} ka = \infty$, тому умови, при яких перетину вже не буде, потрібно визначити як $U_0 \leq E$. Найменший корінь рівняння $ka = \frac{\pi}{2}$ дає: $E_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m_0 a^2}$. Таким чином, умова відсутності коренів (тобто відсутності дозволених енергетичних рівнів) має вигляд $U_0 \leq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$.

79. Вирішити попередню задачу за умови $E > U_0$.

Розв'язок.

Запишемо рівняння Шредінгера для двох областей:

$$\psi_1'' + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad 0 \leq x \leq a$$

$$\psi_2'' + k_2^2 \psi_2 = 0, \quad x \geq a,$$

$$\text{де } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k_2^2 = \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}.$$

Їх загальні розв'язки мають вигляд

$$\psi_1 = A_1 \sin k_1 x + A_2 \cos k_1 x,$$

$$\psi_2 = B_1 \sin k_2 x + B_2 \cos k_2 x.$$

і повинні відповідати таким граничним умовам:

$$\psi_1(0) = 0,$$

$$\psi_1(a) = \psi_2(a),$$

$$\psi_1'(a) = \psi_2'(a),$$

або в розкритому вигляді

$$A_1 \sin k_1 a = B_1 \sin k_2 a + B_2 \cos k_2 a$$

$$k_1 A_1 \cos k_1 a = k_2 (B_1 \cos k_2 a - B_2 \sin k_2 a).$$

Із цих рівнянь можна виключити тільки дві з трьох постійних, які містяться в них, A_1 , B_1 і B_2 , наприклад B_1 і B_2 , в результаті чого отримаємо умову

$$f(k_1, k_2, A_1) = 0.$$

Цієї умові можна задовольнити при будь-яких значеннях енергії E в області $E > U_0$.

80. На підставі результатів задачі 77 знайти:

а) значення величини $a^2 U_0$, при якому з'являється n -ий дискретний рівень;

б) число рівнів в ямі, у якій $a^2 U_0 = \frac{110\hbar^2}{m}$;

в) значення $a^2 U_0$, при якому енергія єдиного рівня дорівнює $E = \frac{U_0}{2}$. Яка при цьому ймовірність знаходження частинки поза ямою?

Відповідь: а) $a^2 U_0 = (2n - 1)^2 \frac{n^2 \hbar^2}{8m}$; б) 5 рівнів; в) $a^2 U_0 = \frac{9n^2 \hbar^2}{16m}$,

$W(a < x < \infty) = 0,15$.

81. Частинка масою m знаходиться в одновимірній симетричній потенціальній ямі (див. рис.).

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \leq 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ U_0, & x \geq a \end{cases}$$

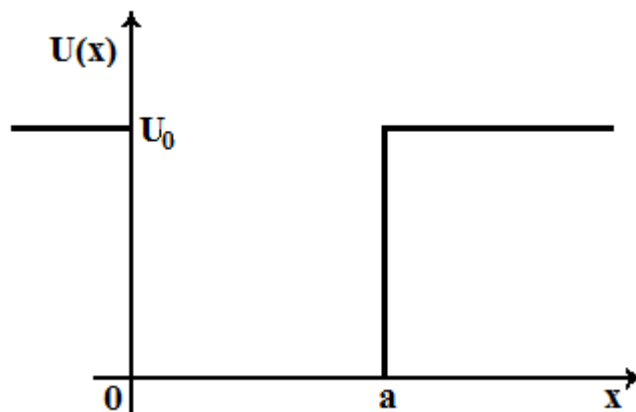


Рисунок до задачі 81

Отримати рівняння, що визначає спектр можливих значень енергії в області $E < U_0$. Обґрунтувати дискретність такого енергетичного спектру.

Розв'язок.

Записавши рівняння Шредінгера для трьох областей, заданих в умові, його загальних рішень для цих областей і вимагаючи виконання граничних і стандартних умов, знайдемо в результаті необхідне рівняння

$$\operatorname{tg} k_0 a = -\frac{2k_0 k}{k^2 - k_0^2},$$

де $k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$, тобто

$$\operatorname{tg} \frac{a\sqrt{2mE}}{\hbar} = -\frac{2\sqrt{E(U_0-E)}}{U_0-2E}.$$

Корені цього рівняння знаходяться як абсциси точок перетину графіків, що зображують ліву і праву частини його. Видно, що абсциси цих точок визначають дискретний енергетичний спектр частинки. На відміну від потенціальної ями зад. 77 в розглянутому випадку точки перетину (рішення) існують завжди, тобто за будь-якої конфігурації даної ями (див. рисунок графічного розв'язку).

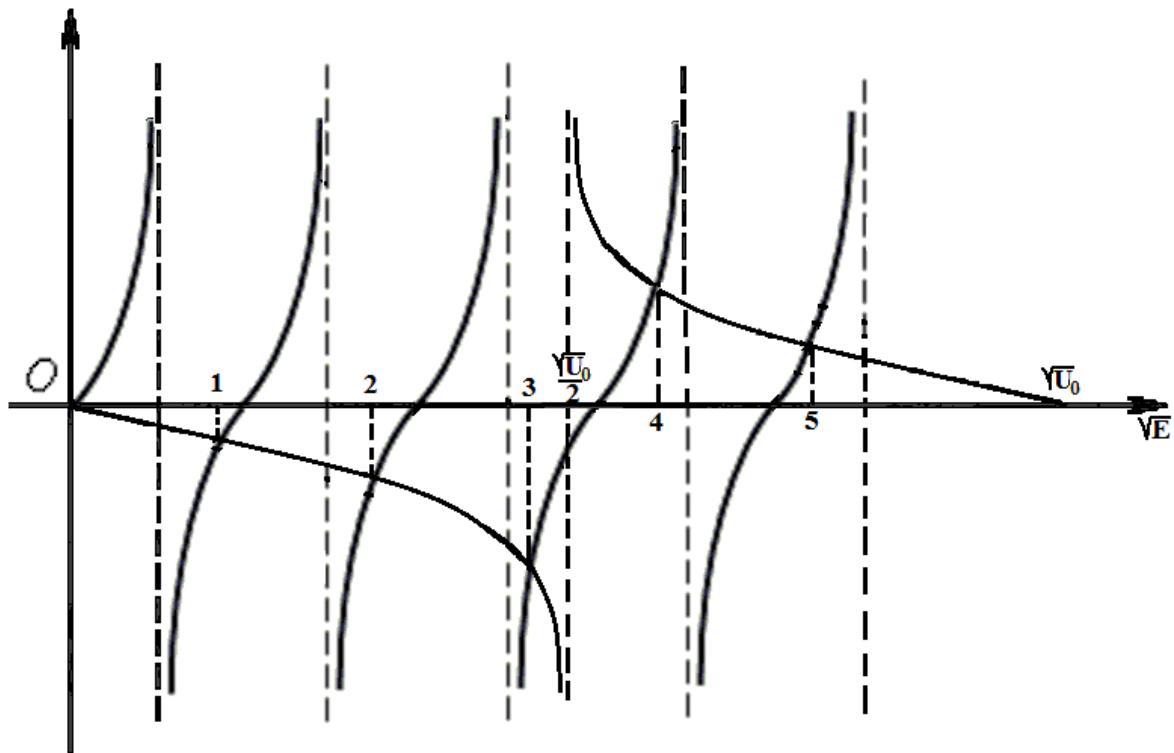


Рисунок до задачі 81.

82. З міркувань симетрії, очевидно, що ймовірності знаходження частинки ліворуч і праворуч від ями (задача 81) повинні бути рівні за умови $E < U_0$. Перевірити це безпосереднім розрахунком.

83. За якої умови ймовірності знаходження частинки, повна енергія якої $E < U_0$, будуть рівні поза і всередині потенціальної ями, розглянутої в задачі 81. Розв'язок.

Хвильові функції, що описують рух частинки поза і всередині ями, мають вигляд

$$\begin{aligned}\psi_1 &= Ae^{kx}, & x < 0, \\ \psi_2 &= B_1 \sin k_0 x + B_2 \cos k_0 x, & 0 < x < a, \\ \psi_3 &= Be^{-kx}, & x > a,\end{aligned}$$

$$\text{де } k = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}, k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

З граничних умов $\psi_1(0) = \psi_2(0)$, $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$ виходить

$$A = B_2, Ak = B_1 k_0.$$

Запишемо рівність ймовірностей поза і всередині ями

$$2 \int_{-\infty}^0 A^2 e^{2kx} dx = \int_0^a (B_1 \sin k_0 x + B_2 \cos k_0 x)^2 dx$$

У результаті інтегрування і виразу B_1 і B_2 через A отримаємо

$$(k^2 - k_0^2) \sin 2k_0 a = 4k_0 k \sin^2 k_0 a + 4k_0^3 \left(a - \frac{1}{k}\right).$$

84. Визначити рівні енергії і хвильові функції частинки, що знаходиться в одновимірній несиметричній потенціальній ямі.

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ U_2, & x > a \end{cases}$$

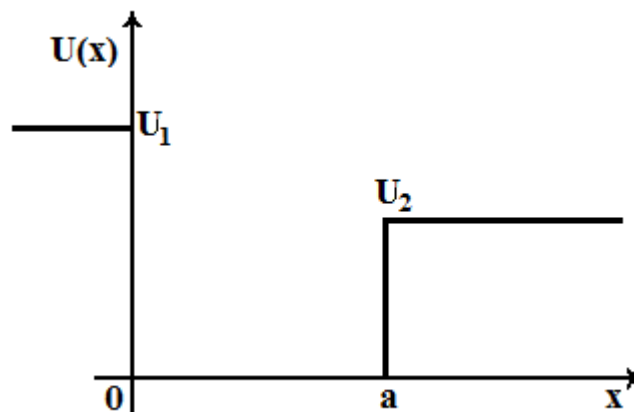


Рисунок до задачі 84 (а).

Розв'язок.

Запишемо рівняння Шредінгера для трьох областей

$$\frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_1) \psi_1 = 0, x < 0,$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2 = 0, 0 < x < a,$$

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_2)\psi_3 = 0, x > a.$$

При введенні позначень

$$\kappa_1 = \frac{\sqrt{2m(U_1-E)}}{\hbar}, \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(U_2-E)}}{\hbar},$$

знаходимо, що загальний розв'язок в кожній області має наступний вигляд:

$$\psi_1 = A_1 e^{-\kappa_1 x} + B_1 e^{\kappa_1 x}, x < 0,$$

$$\psi_2 = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x}, 0 < x < a,$$

$$\psi_3 = A_2 e^{-\kappa_2 x} + B_2 e^{\kappa_2 x}, x > a.$$

Розглянемо дискретний спектр $E < U_2$. Тоді κ_1 і κ_2 дійсні величини.

Вважаючи в області $0 < x < a$ $\kappa = ik$, де k - дійсне, запишемо розв'язок у вигляді

$$\psi_2 = \sin(kx + \delta).$$

У силу скінченності хвильової функції $A_1 = 0, B_2 = 0$.

Умову безперервності ψ і $\frac{d\psi}{dx}$ зручніше записати як умову безперервності логарифмічної похідної $\frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx}$

$$\kappa_1 = k \operatorname{ctg} \delta,$$

$$-\kappa_2 = \operatorname{ctg}(ka + \delta).$$

Перепишемо останні дві умови, виразивши κ_1 і κ_2 через k

$$\sqrt{\frac{2mU_1}{\hbar^2 k^2}} - 1 = \operatorname{ctg} \delta,$$

$$-\sqrt{\frac{2mU_2}{\hbar^2 k^2}} - 1 = \operatorname{ctg}(ka + \delta).$$

Оскільки ctg є періодичною функцією з періодом π , величини δ і $ka + \delta$ можна представити у вигляді

$$\delta = \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}} + n_1 \pi,$$

$$ka + \delta = -\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_2}} + n_2 \pi.$$

Причому значення $\arcsin$ лежать в області $(0, \frac{\pi}{2})$. Виключаючи δ , знаходимо трансцендентне рівняння для визначення рівнів енергії в дискретному спектрі

$$ka = n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}} - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_2}}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0.$$

Значення k , що задовольняють цьому рівнянню, зручно знаходити графічно.

Ці значення визначаються точками перетину прямої $y = ka$ та кривими $y =$

$$n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}} - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_2}} \text{ (див. рис.)}$$

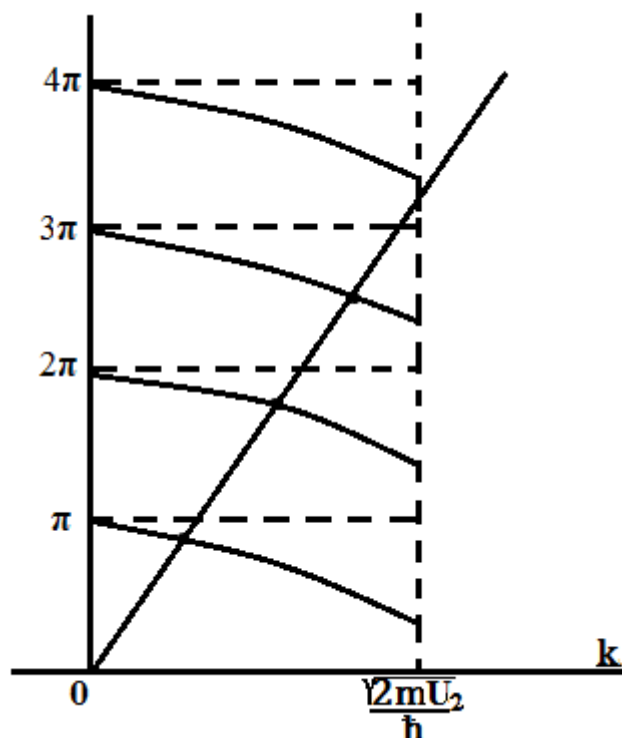


Рисунок до задачі 84 (б).

85. Частинка масою m знаходиться у двохвимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками ($0 < x < a$, $0 < y < b$). Визначити спектр власних значень енергії і власні функції частинки. Обчислити ймовірність її знаходження в області $\frac{1}{3}a \leq x \leq \frac{2}{3}a$, $\frac{1}{3}b \leq y \leq \frac{2}{3}b$ для основного стану. Відобразити (наприклад, для стану, що характеризується квантовими числами $n_1=3$ і $n_2=2$) положення точок, в яких

густина ймовірності перебування частинки дорівнює нулю, і точок, в яких вона досягає максимальних значень.

Розв'язок.

Запишемо рівняння Шредінгера всередині ями

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$$

Так як хвильова функція обертається в нуль на стінках ями, де $x=0$ і $y=0$, то розв'язок зручно шукати відразу у вигляді добутку синусів

$$\psi = A \sin k_1 x \sin k_2 y.$$

Величини k_1 і k_2 знайдемо з тієї умови, що $\psi = 0$ при $x = a$ і $y = b$.

Отримаємо

$$k_1 = \pm \frac{\pi}{a} n_1, n_1 = 1, 2, 3, \dots$$

$$k_2 = \pm \frac{\pi}{b} n_2, n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

У результаті підстановки хвильової функції в рівняння Шредінгера знайдемо вираз для визначення дозволених значень енергії частинки

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} \right).$$

Легко бачити, що найменша можлива енергія частинки не може дорівнювати нулю, і при $a = b$ енергетичні рівні стають виродженими.

З умови нормування знайдемо

$$\psi_{n_1 n_2}(x, y) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b}$$

$$W \left(\frac{1}{3} a \leq x \leq \frac{2}{3} a, \frac{1}{3} b \leq y \leq \frac{2}{3} b \right) = \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \right)^2 \approx 0,37.$$

86. Визначити власні значення енергії та власні функції для частинки масою m , що знаходиться в тривимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками ($0 < x < a$, $0 < y < b$, $0 < z < c$). Обчислити значення енергії для перших трьох рівнів, якщо $a = b = c$.

$$\text{Відповідь: } \psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c};$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right) \text{ (где } n_1 = 1, 2, 3, \dots; n_2 = 1, 2, 3, \dots; n_3 = 1, 2, 3, \dots).$$

87. Привести рівняння Шредінгера для лінійного гармонічного осцилятора до виду $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0$ за допомогою введення нової змінної $\xi = \alpha x$. Визначити значення констант α і λ .

Вказівка. Виходити з гамільтоніана $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$.

Після запису рівняння Шредінгера ввести нову змінну $\xi = \alpha x$, $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, тоді

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}.$$

Скінченні, безперервні і однозначні рішення рівняння, записаного в умові завдання, існують тільки при $\lambda = 2n + 1$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$).

88. Знайти власні функції гармонічного осцилятора, що відповідають першим трьом станам ($n = 0, 1, 2$). Переконатися, що число вузлів функції ψ_n збігається зі значенням n . Визначити характер розподілу ймовірності місцезнаходження частинки в цих станах.

Відповідь. $\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$, $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} 2\alpha x$, $\psi_2(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} (4\alpha^2 x^2 - 2)$. (Див.(5.5), (5.7) та зв'язок між ξ та x).

Характер розподілу ймовірності частинки в станах $n = 0, 1, 2$ зображений на рисунку, де пунктирна крива відповідає вигляду потенціальної ями.

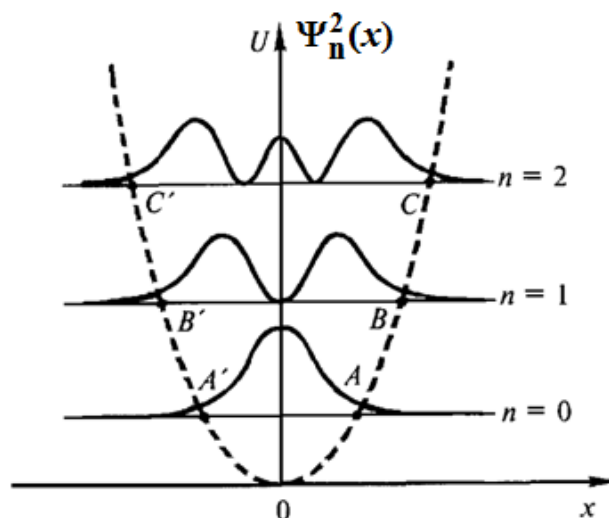


Рисунок до задачі 88.

89. Довести ортогональність перших двох власних функцій гармонічного осцилятора.

90. Для лінійного гармонічного осцилятора, що знаходиться в n -ому енергетичному стані, обчислити $\overline{x^2}$ і середню потенціальну енергію.

Відповідь: $\overline{(x^2)}_n = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right)$, $\overline{U}_n = \frac{m\omega^2}{2} \overline{(x^2)}_n = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} E_n$.

91. Знайти розподіл ймовірностей різних значень імпульсу для лінійного гармонічного осцилятора.

Розв'язок.

Оператор координати в імпульсному представленні має вигляд

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}.$$

Тому гамільтоніан $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$ в імпульсному представленні набуває вигляду

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2 m \omega^2}{2} \frac{d^2}{dp^2},$$

і, отже, для рівняння Шредінгера маємо

$$\frac{d^2 \psi(p)}{dp^2} + \frac{2}{\hbar^2 m \omega^2} \left(E - \frac{p^2}{2m}\right) \psi(p) = 0$$

При введенні безрозмірної змінної $\eta = \frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}$ і позначення $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ приходимо до рівняння, яке аналогічне рівнянню Шредінгера для цієї ж задачі в x -представленні. Тому розв'язок його описуються хвильовими функціями (5.5) з урахуванням (5.7), тобто

$$\psi_n(\eta) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\frac{\eta^2}{2}} \cdot \frac{d^n e^{-\eta^2}}{d\eta^n}.$$

Повертаючись до змінної p , для шуканого розподілу ймовірностей потрібно врахувати, що

$$|\psi_n(p)|^2 = |\psi_n(\eta)|^2 \frac{d\eta}{dp}.$$

92. Частинка рухається в потенціальному полі $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Визначити ймовірність знаходження частинки поза класичних кордонів для основного стану.

Розв'язок.

Класичними кордонами (точками повороту) називають абсциси точок перетину енергетичного рівня з графіком потенціальної ями. У нашому випадку $x_{\text{пов.}}$ виразиться з умови

$$E_0 = \frac{m\omega^2 x_{\text{пов.}}^2}{2},$$

тобто

$$\frac{\hbar\omega}{2} = \frac{m\omega^2 x_{\text{пов.}}^2}{2}, \quad x_{\text{пов.}} = \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Як впливає з задачі 87, $x_{\text{пов.}} = \pm \frac{1}{\alpha}$ і $\xi_{\text{пов.}} = \pm 1$.

Функція $\psi_0(\xi) = C_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ (див. задачу 88). Внаслідок симетрії ями щодо осі ординат, для шуканої ймовірності маємо

$$W = \int_{-1}^1 C_0^2 e^{-\xi^2} d\xi.$$

З умови нормування $C_0^2 = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi}$.

Остаточно отримуємо

$$W = \frac{\int_{-1}^1 e^{-\xi^2} d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi}.$$

Відомо, що $\int_0^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$, а $\int_{\pm x}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2} [1 \mp \Phi(x)]$,

де $\Phi(x)$ – інтеграл помилок, причому $\Phi(1) \approx 0,84$.

Таким чином, $W \approx 0,16$.

93. Знайти енергетичні рівні частинки, що рухається в потенціальному полі наступного виду: $U(x) = \infty$ ($x < 0$); $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ ($x > 0$).

Розв'язок.

Хвильова функція повинна обертатися в нуль при $x = 0$. При $x > 0$ вона задовольняє рівнянню Шредінгера для звичайного осцилятора. Неважко

бачити, що хвильові функції осцилятора при непарному $n = 2k + 1$ обертаються в нуль при $x = 0$ і в області $x \geq 0$ дають розв'язок розглянутої задачі. Отже, $E_k = \hbar\omega\left(2k + \frac{3}{2}\right)$, $k = 0, 1, 2, \dots$

94. Знайти коефіцієнт відбиття від одновимірного прямокутного потенціального бар'єру виду:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \text{ (область I)} \\ U_0, & x > 0 \text{ (область II)} \end{cases}$$

Розв'язок.

Хвильові функції у вказаних областях запишемо так:

$$\psi_I(x) = e^{ik_1x} + be^{-ik_1x}, \quad \psi_{II}(x) = ce^{ik_2x},$$

$$\text{де } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}.$$

Коефіцієнти b і c визначаються з умов «зшивання» в точці $x = 0$ функції ψ та її похідної ψ' :

$$1 + b = c, \quad k_1(1 - b) = k_2c.$$

Звідси знаходимо

$$c = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \quad b = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}.$$

Коефіцієнт відбиття, за визначенням, $R = |b|^2$. Таким чином

$$R = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2.$$

При $E < U_0$, $k_2 = i|k_2|$ коефіцієнт відбиття обертається в одиницю.

Зауваження.

Згідно з виглядом функції $U(x)$, бар'єр має нескінченну ширину (такий бар'єр називають стінкою (у даному випадку - прямокутною)).

95. Знайти струм холодної емісії електронів з металу.

Розв'язок.

Явище холодної емісії полягає в тому, що сильне електричне поле (порядку 10^6 В/см), прикладене до металу так, щоб метал був катодом, вириває з нього електрони. Відомо, що, для того щоб вирвати електрон з металу, йому потрібно надати деяку енергію, не меншу так званої роботи виходу електрона

з металу. Це свідчить про те, що потенціальна енергія електрона в металі менша, ніж поза ним. Тобто на поверхні металу виникає прямокутний потенціальний бар'єр висотою рівною роботі виходу, і нескінченної ширини. Найбільш простим чином цей факт може бути виражений, якщо ми, по-перше, розглянемо одновимірний випадок і, по-друге, приймемо, що потенціальна енергія електронів усередині металу дорівнює нулю, що відповідає моделі вільних електронів. Позначимо висоту бар'єру (роботу виходу) через C . Розподіл по енергіях електронів електронного газу такий, що переважна більшість електронів має енергію $E < C$ (при абсолютному нулі електрони заповнюють всі рівні енергії від $E < 0$ до $E = \varepsilon_F < C$, де ε_F – так звана енергія Фермі). Потік електронів, що падає зсередини металу на його поверхню, позначимо через j_0 . Так як електрони мають енергію $E < C$, то цей потік повністю відбивається від стрибка потенціалу C . Якщо на метал накладено електричне поле, напруженість якого $\mathcal{E}$ спрямована до поверхні металу, то до потенціальної енергії електрона $U(x)$ додається потенціальна енергія електрона в електричному полі $\mathcal{E}$, яка у разі постійності і однорідності цього поля дорівнює $-e\mathcal{E}x$ (заряд електрона $-e$). Будемо пам'ятати також, що електричне поле практично не проникає в метал. В результаті прямокутний бар'єр нескінченної ширини перетворюється на трикутний бар'єр, позначений на малюнку пунктиром. Аналітично форма цього бар'єру задається наступним чином

$$\begin{cases} U'(x) = U(x) - e\mathcal{E}x = C - e\mathcal{E}x & , \quad x > 0 \\ U'(x) = 0 & , \quad x < 0 \end{cases}$$

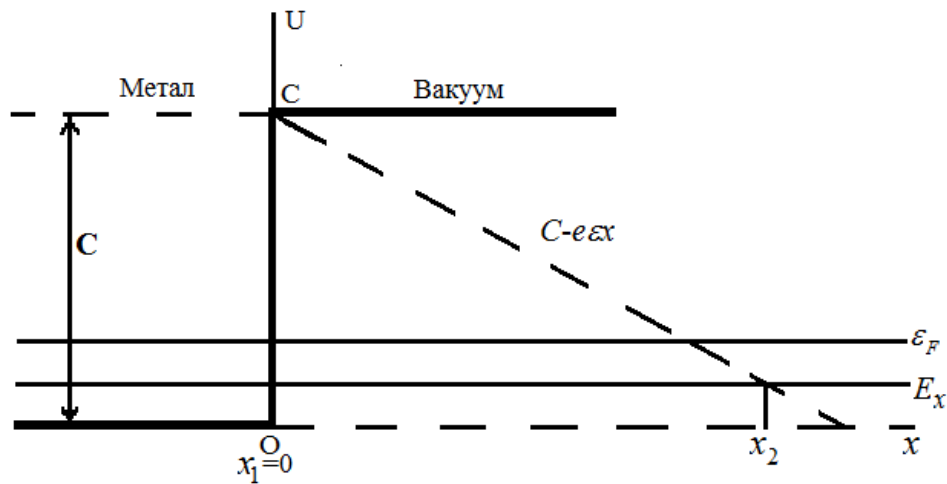


Рисунок до задачі 95.

Обчислимо коефіцієнт прозорості цього бар'єру для електронів, що мають енергію руху по осі ОХ, рівну E_x . Згідно (5.8) задача зводиться до обчислення інтеграла

$$J = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U'(x) - E_x)} dx,$$

де x_1 и x_2 – координати точок повороту.

Як видно з рисунка, $x_1 = 0$, $x_2 = \frac{C - E_x}{e\varepsilon}$. Отже,

$$J = \int_0^{\frac{C - E_x}{e\varepsilon}} \sqrt{2m(C - e\varepsilon x - E_x)} dx.$$

Введемо змінну інтегрування $\xi = \frac{e\varepsilon}{C - E_x} x$. Отримаємо

$$J = \sqrt{2m} \frac{(C - E_x)^{3/2}}{e\varepsilon} \int_0^1 \sqrt{1 - \xi} d\xi = \frac{2}{3} \sqrt{2m} \frac{(C - E_x)^{3/2}}{e\varepsilon}.$$

Таким чином, для коефіцієнта прозорості отримаємо

$$D(E_x) = D_0 \exp \left\{ -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{(C - E_x)^{3/2}}{e\varepsilon} \right\}$$

Для різних E_x цей коефіцієнт різний, але так як $C > E_x$, то середній (по енергіях електронів) коефіцієнт прозорості можна записати у вигляді

$$\bar{D} = \bar{D}_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}},$$

де $\bar{D}_0$ і ε_0 – константи, що залежать від роду металів. Струм холодної емісії дорівнює

$$j(\varepsilon) = j_0 \bar{D} = A e^{-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}}.$$

96. Бар'єр має вигляд, зображений на рисунку. Обчислити коефіцієнт прозорості бар'єра для частинки масою m при енергії $E < U_0$.

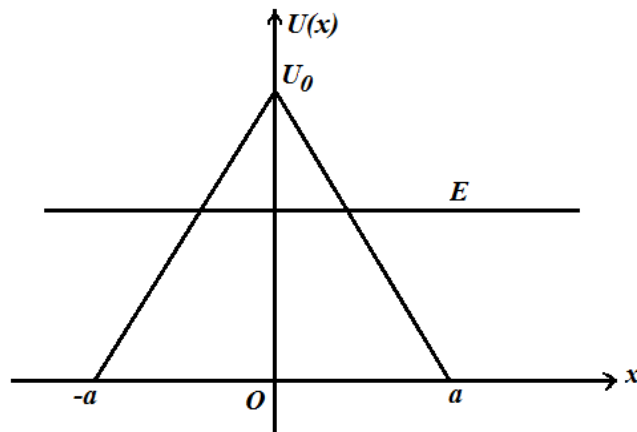


Рисунок до задачі 96.

Відповідь: $D = D_0 \exp \left\{ -\frac{8}{3} \frac{\sqrt{2}}{\hbar U_0} \sqrt{m} a (U_0 - E)^{3/2} \right\}$.

97. Знайти коефіцієнт прозорості бар'єра, заданого потенціальною кривою $U(x) = U_0 \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right)$, для частинки масою m та енергією $E < U_0$.

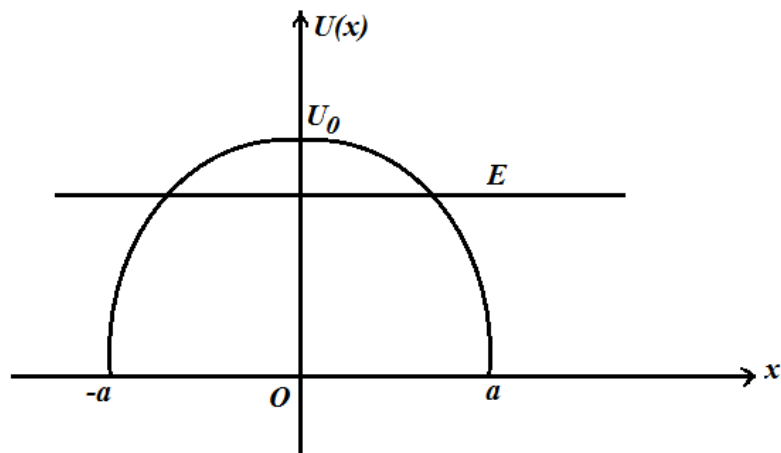


Рисунок до задачі 97.

Відповідь: $D = D_0 \exp \left\{ -\frac{\pi a}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} (U_0 - E) \right\}$.

98. Показати виникнення зонної структури енергетичного спектру в кристалі на прикладі найпростішого періодичного поля, розглянутого Кронігом і Пенні (задача Кроніга і Пенні).

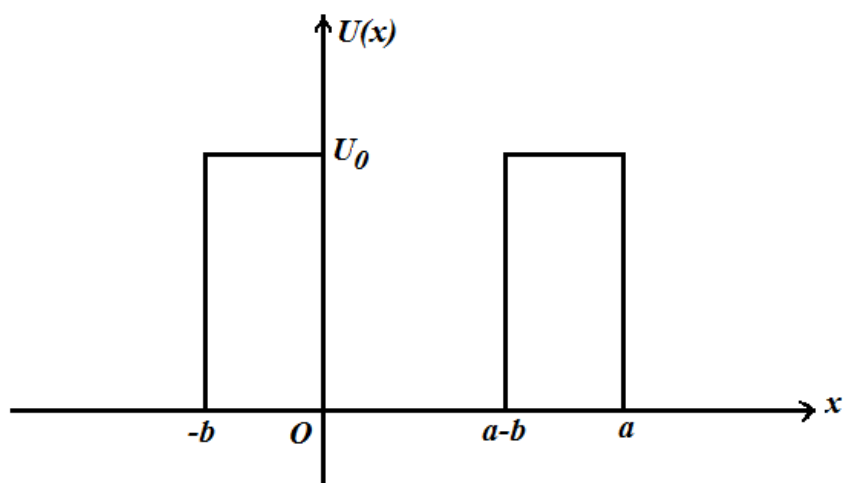


Рисунок до задачі 98. Потенціал Кроніґа-Пенні.

Розв'язок.

Зробимо кілька попередніх зауважень.

Найбільш характерною властивістю твердих тіл є їх кристалічна структура – структура решітки, тобто таке розташування ядер атомів, яке може бути отримано шляхом повторення елементарної комірки. У силу цієї особливості, яка називається трансляційною інваріантністю, можна визначити структуру кристала, знаючи структуру лише однієї комірки. Дійсно, якщо ввести вектор решітки

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad (1)$$

де $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ – одиничні некопланарні базисні вектори, а n_1, n_2, n_3 – будь-які цілі числа, можна сказати, що трансляційна інваріантність кристала проявляється у незмінності його структури щодо зсувів на вектор $\vec{n}$ при будь-яких цілих числах n_i . Електрони твердого тіла рухаються в електричному полі атомних ядер, а також взаємодіють між собою. Загальна задача про рух таких електронів надзвичайно складна. Серед різних методів наближеного розв'язку цієї задачі досить плідним виявився метод одноелектронного наближення. Основна ідея цього методу полягає в тому, щоб рух багатьох електронів замінити рухом одного електрона в полі заданого ефективного потенціалу, який враховує поряд з полем ядер частково і взаємодію з іншими електронами. Хвильова функція одноелектронної задачі повинна, таким чином, задовольняти стаціонарному рівнянню Шредінгера

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (2)$$

де оператор Гамільтона

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) \quad (3)$$

включає в себе ефективну потенціальну енергію $U(\vec{r})$.

У силу сказаного вище функція $U(\vec{r})$ повинна володіти трансляційною симетрією, тобто бути періодичною функцією з періодом решітки

$$U(\vec{r} + \vec{n}) = U(\vec{r}). \quad (4)$$

З періодичної структури кристала впливає ряд загальних властивостей власних функцій.

Розглянемо оператор $\hat{T}_n$ (оператор трансляції), дія якого на хвильову функцію полягає в зміщенні координати на період решітки

$$\hat{T}_n\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{n}). \quad (5)$$

У силу (4) очевидно, що оператор $\hat{T}_n$ комутує з гамільтоніаном (3) і тому володіє спільними з ним власними функціями

$$\begin{aligned} (\hat{H} - E)\psi &= 0 \\ (\hat{T}_n - t_n)\psi &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Зауважимо, що нормування хвильової функції не повинно залежати від зсуву початку координат. Тому власні значення оператора трансляції t_n

$$\hat{T}_n\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{n}) = t_n\psi(\vec{r}) \quad (7)$$

повинні дорівнювати за модулем одиниці. Виразимо це у вигляді

$$t_n = e^{i(\vec{k}\vec{n})}, \quad (8)$$

де $\vec{k}$ – хвильовий вектор, причому $\hbar\vec{k}$ має назву квазіімпульсу. Зауважимо, що у випадку вільного руху електронів ($U(\vec{r}) = 0$) $\hbar\vec{k}$ є істинним імпульсом. Таким чином, стани електронів в кристалі можна характеризувати значеннями квазіімпульсу $\hbar\vec{k}$:

$$\hat{T}_n\psi_{\vec{k},\mu}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k},\mu}(\vec{r} + \vec{n}) = e^{i(\vec{k}\vec{n})}\psi_{\vec{k},\mu}(\vec{r}), \quad (9)$$

де под μ розуміємо інші (крім $\vec{k}$) квантові числа.

Приступимо тепер безпосередньо до розв'язку задачі, в якій потенціал має вигляд, зображений на рисунку.

Розв'язки рівняння Шредінгера виберемо у виді

$$\psi_1(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}, \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (10)$$

в областях, де $U(x) = 0$, і

$$\psi_2(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, \beta = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \quad (11)$$

в областях $U(x) = U_0$ (області бар'єру).

Умови зшивання функції та її похідної на границях $-b, 0, a - b$ запишемо у вигляді

$$\psi_2(0) = \psi_1(0), \psi'_2(0) = \psi'_1(0), \quad (12)$$

а також

$$\left. \begin{aligned} \psi_2(-b) &= e^{-i\lambda a} \psi_1(a - b) \\ \psi'_2(-b) &= e^{-i\lambda a} \psi'_1(a - b) \end{aligned} \right\}, \quad (13)$$

де λ – дійсна величина.

В останніх співвідношеннях ми скористалися загальними властивостями хвильових функцій електрона в періодичному полі, що підкоряються закону трансляції (9), що в нашому випадку має вигляд

$$\psi(x + a) = e^{ika} \psi(x).$$

Підставляючи рішення рівняння Шредінгера (10) і (11) в умови зшивання (12) і (13), отримуємо рівняння для визначення невідомих постійних A, B, C, D, λ :

$$\begin{aligned} C + D &= A + B, \\ C - D &= i \frac{\alpha}{\beta} (A - B), \\ Ce^{-\beta b} + De^{\beta b} &= e^{-i\lambda a} [Ae^{i\alpha(a-b)} + Be^{-i\alpha(a-b)}], \\ Ce^{-\beta b} - De^{\beta b} &= \frac{i\alpha}{\beta} e^{-i\lambda a} [Ae^{i\alpha(a-b)} - Be^{-i\alpha(a-b)}]. \end{aligned} \quad (14)$$

З (14) неважко отримати

$$\left. \begin{aligned} (A+B)[ch\beta b - e^{-i\lambda a} \cos\alpha(a-b)] &= i(A-B) \left[\frac{\alpha}{\beta} sh\beta b + e^{-i\lambda a} \sin\alpha(a-b) \right] \\ (A+B) \left[sh\beta b - \frac{\alpha}{\beta} e^{-i\lambda a} \sin\alpha(a-b) \right] &= i(A-B) \left[\frac{\alpha}{\beta} ch\beta b - \frac{\alpha}{\beta} e^{-i\lambda a} \cos\alpha(a-b) \right] \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Ці рівняння сумісні, якщо визначник дорівнює нулю, тобто якщо

$$\cos\lambda a = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} sh\beta b \sin\alpha(a-b) + ch\beta b \cos\alpha(a-b). \quad (16)$$

Звідси графічним методом можна визначити енергетичний спектр, маючи на увазі, що права частина (16) за модулем не повинна перевищувати значення, рівне одиниці. Спростимо дещо задачу і для більшої наочності її розв'язку перейдемо у виразі для потенціальної функції, яке випливає з рисунка, до ланцюжка δ -функцій, вважаючи, що $b \rightarrow 0, U_0 \rightarrow \infty$.

Але при такому граничному переході величина

$$\frac{mU_0}{\hbar^2} ab = \gamma, \quad (17)$$

пропорційна площі всередині бар'єру, залишається скінченною. Тоді, враховуючи, що в цьому наближенні $sh\beta b \approx \beta b$, $ch\beta b \approx 1$, замість (16) отримаємо

$$\cos\lambda a = \gamma \frac{\sin\alpha a}{\alpha a} + \cos\alpha a. \quad (18)$$

Оскільки λ - дійсна величина, це рівняння задовольняється в тому випадку, якщо права його частина змінюється в межах від -1 до +1.

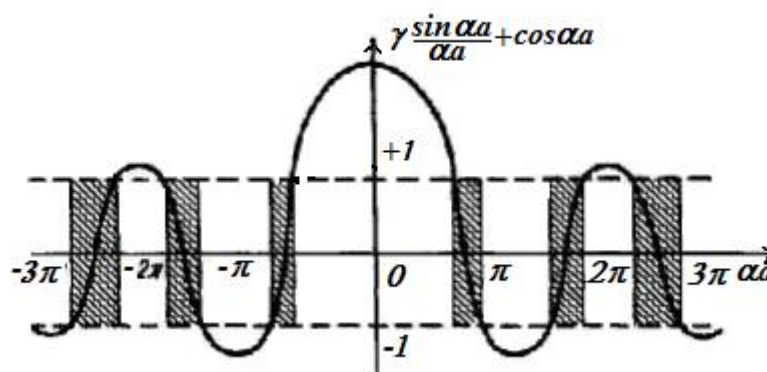


Рисунок до задачі 98.

Графік допустимих значень енергії в моделі Кроніга-Пенні.

Ми бачимо, що в цьому прикладі енергетичний спектр виявляє зонну структуру –смуги дозволених і заборонених значень енергії, що чергуються.

99. Частинка масою m знаходиться в сферично-симетричному потенціальному полі

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0 \\ U_0, & r > r_0 \end{cases}$$

Показати за допомогою підстановки $R(r) = \frac{\mathcal{H}(r)}{r}$, що рівняння, яке визначає власні значення енергії частинки в s – стані ($l = 0$) при $E < U_0$, має вигляд

$$\sin kr_0 = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mr_0^2 U_0}} kr_0,$$

де $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Який енергетичний спектр частинки в цьому випадку?

Розв'язок.

Використовуючи радіальне рівняння Шредінгера (6.8) з урахуванням $l = 0$ і підстановку $R(r) = \frac{\mathcal{H}(r)}{r}$, отримаємо

$$\mathcal{H}_1'' + k^2 \mathcal{H}_1 = 0 \text{ при } r < r_0 \left(k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \right);$$

$$\mathcal{H}_2'' - \beta^2 \mathcal{H}_2 = 0 \text{ при } r > r_0 \left(\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \right).$$

Розв'язки цих рівнянь мають вигляд

$$\mathcal{H}_1 = A \sin kr + B \cos kr,$$

$$\mathcal{H}_2 = C_1 e^{-\beta r} + C_2 e^{\beta r}.$$

З вимоги скінченності функції $R(r)$ у всьому просторі слідує $B = 0$ і $C_2 = 0$.

Таким чином,

$$R_1 = A \frac{\sin kr}{r}, R_2 = C_1 \frac{e^{-\beta r}}{r}.$$

Так як в s - стані $\mathcal{Y} = \mathcal{Y}_{00}(\theta, \varphi) = 1$, то $\psi_1 = R_1$, $\psi_2 = R_2$

З умови безперервності функції та її першої похідної в точці $r = r_0$ знаходимо:

$$A \sin kr_0 = C_1 e^{-\beta r_0}$$

$$A \cos kr_0 = -C_1 \frac{\beta}{k} e^{-\beta r_0}.$$

Звідси

$$\operatorname{tg} kr_0 = -\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}},$$

або

$$\sin kr_0 = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mr_0^2 U_0}} kr_0.$$

Цим рівнянням визначається дискретний енергетичний спектр частинки.

100. Знайти вид сферично-симетричних хвильових функцій $R(r)$ частинки, яка рухається в сферично-симетричній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками: $U(r) = 0$ при $r < r_0$ і $U(r) = \infty$ при $r \geq r_0$. Визначити відповідні власні значення енергії частинки.

Відповідь: використовуючи підстановку $R(r) = \frac{\mathcal{H}(r)}{r}$, отримаємо

$$R(r) = A \frac{\sin kr}{r}, \text{ де } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mr_0^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

101. Частинка масою m рухається в потенціальному полі

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}.$$

Знайти найменше значення U_0 , при якому є зв'язаний стан з нульовою енергією і нульовим моментом кількості руху.

Розв'язок.

Так як момент кількості руху дорівнює нулю, то рівняння Шредінгера зводиться, як і в задачах 99 і 100, до рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi = E\psi \text{ (поза ями)}$$

$$\text{і} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi = (U_0 + E)\psi \text{ (всередині ями)}.$$

Зробивши заміну $\mathcal{H} = r\psi$, перетворимо рівняння до виду:

$$\mathcal{H}'' - \alpha^2 \mathcal{H} = 0 \text{ при } r > a$$

$$\text{і} \quad \mathcal{H}'' + \beta^2 \mathcal{H} = 0 \text{ при } 0 \leq r \leq a,$$

$$\text{де } \alpha = \left(-\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}, \quad \beta = \left[\frac{2m(U_0 + E)}{\hbar^2} \right]^{1/2}.$$

Розв'язком цих рівнянь є

$$\psi = \begin{cases} A \frac{e^{-\alpha r}}{r}, & \text{для } r > a \\ B \frac{\sin(\beta r)}{r}, & \text{для } r < a \end{cases}$$

(відкинуто сингулярне рішення в нулі). З умови безперервності ψ та її похідної при $r = a$ (еквівалентно і легше для аналізу розгляд безперервності $\mathcal{H}$ та її похідної) випливає, що $\beta \operatorname{ctg}(\beta a) = -\alpha$. При $E \rightarrow 0$ $\alpha \rightarrow 0$, отже, $\operatorname{ctg}(\beta a) \rightarrow 0$. Це має місце при $\beta a = \frac{\pi}{2}$ або $U_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$.

102. Знайти хвильові функції стаціонарних станів і рівні енергії плоского ротатора з моментом інерції $\mathcal{I}$. Яка кратність виродження рівнів?

(Ротатором називається система з двох жорстко пов'язаних одна з одною частинок, що обертається (у площині або в просторі). Момент інерції ротатора дорівнює $\mathcal{I} = \mu a^2$, де μ – приведена маса частинок, a – відстань між ними).

Розв'язок.

Оператор Гамільтона, відповідний до функції Гамільтона класичного плоского ротатора $H = \frac{M_z^2}{2\mathcal{I}}$ ($M_z \equiv p_\varphi$ – проекція моменту ротатора на вісь, перпендикулярну площині обертання), має вигляд $\hat{H} = \frac{\hat{M}_z^2}{2\mathcal{I}} = -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}} \frac{d^2}{d\varphi^2}$.

Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\psi(\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}}\psi''(\varphi) = E\psi(\varphi)$$

з додатковою умовою $\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$ дає енергетичні рівні E_m і нормовані власні функції $\psi_m(\varphi)$:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2\mathcal{I}}, \quad \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi},$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – магнітне квантове число.

Всі рівні енергії плоского ротатора, за винятком основного $m = 0$, двократно вироджені.

Власні функції $\psi_m(\varphi)$ оператора $\hat{H}$ є також власними функціями оператора $\hat{M}_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi}$. Склавши з них лінійні комбінації ($m \neq 0$)

$$\psi_m^{(\pm)} = \frac{\psi_m(\varphi) \pm \psi_{-m}(\varphi)}{\sqrt{2}} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(m\varphi), \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(m\varphi), \end{cases}$$

отримаємо власні функції $\psi_m^{(\pm)}$, які мають певну парність ± 1 при відображенні координат відносно осі X (в площині обертання).

103. Тривимірний ізотропний гармонічний осцилятор має власні значення енергії $\hbar\omega \left(n + \frac{3}{2}\right)$, де $n = 0, 1, 2, \dots$. Яка ступінь виродження квантового стану n ?

Розв'язок.

Стани тривимірного осцилятора однозначно характеризуються набором трьох невід'ємних чисел n_1, n_2, n_3 , що задовольняють рівності $n_1 + n_2 + n_3 = n$. Числа n_1, n_2, n_3 – квантові числа гармонічного осцилятора для збуджень відповідно уздовж осей X, Y і Z . При фіксованих n_3 і n число пар (n_1, n_2) , що задовольняють рівності $n_1 + n_2 = n - n_3$ дорівнює

$$\sum_{n_1=0}^{n-n_3} 1 = n - n_3 + 1.$$

Нарешті, підсумовуючи по n_3 , отримаємо повну ступінь виродження d_n :

$$d_n = \sum_{n_3=0}^n (n + 1 - n_3) = (n + 1)^2 - \frac{n(n+1)}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}.$$

104. Три матеріальні точки з однаковою масою μ рухаються по колу радіусом r . Взаємна відстань між ними фіксована та однакова, так що вони утворюють рівносторонній трикутник. Ці матеріальні точки підкоряються статистиці Бозе і не мають спіна. Дослідити обертальні енергетичні рівні системи.

Розв'язок.

Гамільтоніан системи (також, як у задачі 102) визначається виразом

$$\hat{H} = \frac{\hat{M}_z^2}{2J} = -\frac{\hbar^2}{2J} \frac{d^2}{d\varphi^2}, \text{ де } J = 3\mu r^2, M_z - \text{момент кількості руху, спрямований перпендикулярно до площини обертання.}$$

Власними функціями є $e^{im\varphi}$, де m – ціле число, і, тому, енергетичні рівні даються виразом $E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2J}$. Але оскільки частинки – бозони і хвильова

функція інваріантна стосовно повороту на 120° , то $m = 3n$, де n – ціле число,

$$\text{і } E_n = \frac{9n^2 \hbar^2}{2J}.$$

105. Заданий потенціал Юкави

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-\frac{r}{a}}}{\frac{r}{a}},$$

що відповідає притягуванню між двома частинками (наприклад, між двома нуклонами). У рамках варіаційної процедури Рітца знайти для випадку $l = 0$ оптимальний розв'язок, використовуючи пробну хвильову функцію

$$U = \frac{1}{r} \mathcal{H}(r),$$

$$\text{де } \mathcal{H} = C r e^{-\alpha r},$$

де α – варіаційний параметр Рітца. При якому мінімальному розмірі потенціальної ями можливе існування зв'язаних станів? (У системі центру мас проблема зводиться до одночастинного рівняння Шредінгера з приведеною масою μ).

Розв'язок.

Знайдемо спочатку сталу C з умови нормування

$$\int_0^\infty \mathcal{H}^2 dr = 1.$$

Звідси маємо

$$C = 2\alpha^{3/2} \quad (1)$$

Середнє значення енергії E являє собою суму двох інтегралів:

$$E_{\text{кін}} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(\frac{d\mathcal{H}}{dr} \right)^2 dr$$

$$E_{\text{потен}} = -V_0 \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{r}{a}}}{\frac{r}{a}} \mathcal{H}^2 dr \quad (2)$$

Елементарне інтегрування дає

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} \alpha^2 - V_0 \frac{4a^3 \alpha^3}{(1+2a\alpha)^3} \quad (3)$$

Зручно ввести безрозмірні величини

$$p = 2a\alpha, \quad K = \frac{2\mu a^2}{\hbar^2} V_0 \quad (4)$$

Перша з них являє собою відношення середнього радіуса потенціальної ями до середнього радіусу тієї області, де хвильова функція помітно відрізняється від нуля, друга характеризує ефективний розмір потенціальної ями. Тепер ми можемо перетворити рівність (3) до виду

$$\frac{E}{V_0} = \frac{1}{4K} p^2 - \frac{p^3}{2(1+p)^2}. \quad (5)$$

Використовуючи в якості варіаційного параметру замість величини α величину p , отримаємо оптимальний розв'язок з умови $\frac{dE}{dp} = 0$, яке відразу дає

$$K = \frac{(1+p)^3}{p(p+3)}. \quad (6)$$

Якщо тепер вираз (6) підставити у формулу (5), то знайдемо оптимальне значення енергії

$$E = -V_0 \frac{p^3(p-1)}{4(p+1)^3}.$$

Так як величина p за визначенням позитивна, то зв'язані стани можуть існувати тільки в тому випадку, коли $p > 1$ або, як це випливає з формули (6), коли $k > 2$. У розглянутому наближенні цією нерівністю і визначається мінімальний розмір потенціальної ями, в якій можливе існування зв'язаних станів.

Корисно провести на комп'ютері розрахунки величин K і $-\frac{E}{V_0}$, варіюючи параметр p від 1 до 1,4 з кроком 0,05 і потім від 1,4 до 2,5 з кроком 0,1.

106. Частинка перебуває в центральному полі силового центру з потенціальною енергією $U = -\frac{C}{r^s}$, де C – позитивна стала, а r – відстань від силового центру. Виходячи із співвідношення невизначеностей, показати, що при $s > 2$ можливі стаціонарні стани частинки з необмежено великими за абсолютною величиною негативними власними значеннями повної енергії. Частинка буде переходити на розташовані нижче енергетичні рівні – відбудеться її падіння в точку $r = 0$, тобто на силовий центр. Якщо ж $s < 2$, то найбільш низький енергетичний рівень буде мати кінцеве значення повної

енергії, тобто падіння на силовий центр не відбудеться. Користуючись цими результатами, пояснити можливість існування атомів, наприклад, атома водню, побудованого з протона і електрона.

Розв'язок.

Нехай частинка локалізована навколо силового центру всередині сфери, радіус якої порядку r . Її потенціальна енергія буде порядку $-\frac{C}{r^s}$. Невизначеність координати буде порядку r , а отже, невизначеність імпульсу – порядку $\frac{\hbar}{r}$. Такого ж порядку буде і сам імпульс. Отже, середня кінетична енергія буде порядку $\frac{\hbar^2}{mr^2}$, а повна енергія $E \sim \frac{\hbar^2}{mr^2} - \frac{C}{r^s}$.

Якщо $s > 2$, то E може приймати як завгодно великі негативні значення. Але в такому випадку повинні існувати і рівні енергії з як завгодно великими за абсолютною величиною негативними значеннями E – відбудеться падіння частинки на силовий центр. Якщо ж $s < 2$, то скільки завгодно великі за абсолютною величиною значення E неможливі, а тому й неможливо падіння на силовий центр.

107. Знайти енергетичні рівні воднеподібного атома в s -стані, тобто в такому стані, в якому хвильова функція сферично симетрична щодо ядра атома.

Розв'язок.

Якщо Ze – заряд ядра воднеподібного атома, то потенціал взаємодії його з електроном e (в системі СГСЕ)

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Радіальне рівняння Шредінгера, з урахуванням $l = 0$, має вигляд

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} + \left(\frac{q}{r} - \beta^2\right) \psi = 0, \quad (1)$$

де введені позначення

$$\beta^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad q = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \quad (2)$$

Введемо нову функцію $U(r)$ за формулою

$$\psi = \frac{U(r)}{r} e^{-\beta r}.$$

Тоді

$$\frac{d^2 U}{dr^2} - 2\beta \frac{dU}{dr} + \frac{q}{r} U = 0 \quad (3)$$

Шукаємо розв'язок цього рівняння у вигляді ряду

$$U = \sum_{k=\gamma}^{\infty} a_k r^k, \quad (4)$$

де γ – стале число, поки що не визначене.

Підставляючи (4) в (3) і прирівнюючи члени з однаковими ступенями, прийдемо до співвідношень

$$\gamma(\gamma - 1) = 0, \quad (5)$$

$$k(k + 1)a_{k+1} - 2\beta k a_k + q a_k = 0 \text{ при } k > \gamma \quad (6)$$

З (5) випливає, що або $\gamma = 0$, або $\gamma = 1$. Значення $\gamma = 0$ неможливо, так як тоді при $r = 0$ функція ψ оберталась б у нескінченність як $\frac{1}{r}$, а вона повинна бути кінцевою. (Точніше, виходячи з вимоги збереження числа частинок, можна показати, що ψ може обертатись в нескінченність не швидше, ніж $\frac{1}{r^s}$, де $s < 1$). Тому $\gamma = 1$.

Досліджуємо тепер поведінку ряду (4) на нескінченності. З (6) при $k > 1$ отримуємо

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2\beta k - q}{k(k+1)}. \quad (7)$$

Звідси випливає, що при $k \rightarrow \infty$

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \rightarrow \frac{2\beta}{k+1}.$$

Але коефіцієнти c_k розкладання

$$e^{2\beta r} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k r^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (2\beta r)^k$$

асимптотично поведуться на нескінченності так само, як і коефіцієнти a_k , так як

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{2\beta}{k+1}.$$

Значить, на нескінченності сума ряду (4) асимптотично поводитья як показникова функція $e^{2\beta r}$, а хвильова функція $\psi(r)$ – як $\frac{e^{\beta r}}{r}$, тобто при

довільно вибраному значенні E функція $\psi(r)$ при $r \rightarrow \infty$ обертається в нескінченність. Цього не буде тільки для таких значень E , при яких ряд (4) обривається, тобто переходить в суму кінцевого числа членів. Нехай, наприклад, при $k = n$ чисельник $2\beta k - q = 0$. Тоді, як видно з (7), a_{n+1} і всі наступні коефіцієнти будуть рівні нулю, тобто ряд (4) обірветься. Отже, n -ий енергетичний рівень визначається умовою $2\beta n - q = 0$. Використовуючи його, з (2) знаходимо

$$E = -\frac{mZ^2e^2}{2\hbar^2n^2}, \quad (8)$$

Що збігається з відповідною формулою Бора (система СГСЕ).

108. Показати, що серед сферично симетричних рішень рівняння Шредінгера для воднеподібного атома, скінченних при $r = 0$ і які обертаються в нуль при $r = \infty$, є експоненціальне рішення $e^{-\alpha r}$. Знайти сталу α і енергію атома в розглянутому стані. Що це за стан?

Відповідь:

$\psi = e^{-\frac{qr}{2}}, E = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}$. Стала q визначається виразом (2) розв'язку задачі 107.

Функція ψ представляє основний стан воднеподібного атома.

109. Знайти радіальну густину ймовірності знаходження електрона в воднеподібному атомі для основного стану. При яких значеннях r ця величина є максимальною?

Розв'язок.

Ймовірність того, що електрон в основному стані воднеподібного атома знаходиться від ядра на відстані від r до $r + dr$, тобто між двома сферами радіусів r та $r + dr$, є

$dW_{10}(r) = C^2 |\Psi_{10}(r)|^2 r^2 dr$, де $r^2 dr$ – радіальна частина елементу об'єму в сферичних координатах $d\tau = r^2 dr d\Omega$ ($d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ – елемент тілесного кута), C – нормувальна стала.

Тому реальна густина ймовірності, з урахуванням відповіді задачі 108, дається виразом

$$f_{10}(r) = \frac{dW_{10}(r)}{dr} = C^2 e^{-qr} r^2$$

(значення q див. вираз (2) задачі 107).

$f_{10}(r) = \max$ при $r = \frac{2}{q} = \frac{\hbar^2}{mze^2} = a_1$, де a_1 – радіус першої колової борівської орбіти.

110. Знайти середню відстань $\bar{r}$ електрона від ядра в основному стані воднеподібного атома.

Відповідь: $\bar{r} = \frac{3}{q} = \frac{3}{2} a_1$.

111. Знайти середнє значення зворотної відстані $\left(\frac{1}{r}\right)$ електрона від ядра в основному стані воднеподібного атома.

Відповідь: $\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{q}{2} = \frac{1}{a_1}$.

112. Притягування між електроном і «діркою» в напівпровідниках в ряді випадків можна описувати законом Кулона, який діє в середовищі з деякою діелектричної проникністю ε . Знайти в таких умовах рівні енергії E_n і радіуси a_n екситону – воднеподібної системи, що складається з електрона і «дірки», – при різних значеннях квантових чисел n . Яка енергія зв'язку і характерний радіус a_1 такого екситону при $\varepsilon = 10$ і ефективній масі електрона і «дірки» $m_e = m_h = \frac{m}{10}$ (m – маса вільного електрона)?

Відповідь: $E_n = \frac{e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2 n^2} \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$, $a_n = \frac{\hbar^2 \varepsilon n^2}{e^2} \frac{(m_e + m_h)}{m_e m_h}$.

За зазначених значеннях $|E_1| = \frac{13,5}{2000} \approx 7 \cdot 10^{-3} \text{ еВ}$, $a_1 \approx 10^{-6} \text{ см}$.

113. Знайти середній електростатичний потенціал, який створений $1s$ - електроном в центрі воднеподібного атома.

Розв'язок.

Нормована хвильова функція електрона в $1s$ - стані має вигляд

$$\psi_{1s}(r) = \psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} e^{-\frac{r}{r_1}},$$

де $r_1 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2Z}$ - радіус першої борівської орбіти (СИ).

Об'ємна густина електричного заряду в електронній хмарі

$$\rho(r) = e|\psi_{100}(r)|^2.$$

Таким чином,

$$\varphi_0 = \int_0^\infty \frac{\rho(r)}{4\pi\epsilon_0 r} 4\pi r^2 dr = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r_1}.$$

114. В основному стані воднеподібного атома знайти для електрона $\overline{r^n}$.

Розв'язок.

Враховуючи вид нормованої хвильової функції основного стану

$$\psi_0(r) = (\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{Ze^2 m} \quad (\text{СГСЕ}),$$

знаходимо

$$\overline{r^n} = \int r^n |\psi_0|^2 4\pi r^2 dr = \frac{4}{a^3} \int r^{n+2} e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{(n+2)!}{2} \left(\frac{a}{2}\right)^n.$$

115. Частинка масою m , що знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a , схильна до малого збурення $V(x) = V_0 \cos \frac{2\pi}{a} x$ (a і V_0 – сталі). Визначити поправки до енергії стаціонарних станів з точністю до другого порядку включно.

Розв'язок.

Власні функції і власні значення енергії незбуреного гамільтоніана для частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі мають вигляд:

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x;$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}.$$

Для обчислення поправок до енергії за рахунок стаціонарного збурення знайдемо матричні елементи оператора $\hat{V} = \hat{V}_0 \cos \frac{2\pi}{a} x$

$$V_{mn} = \int_0^a \psi_m^{(0)*}(x) \hat{V} \psi_n^{(0)}(x) dx = \frac{2V_0}{a} \int_0^a \sin \frac{m\pi}{a} x \cos \frac{2\pi}{a} x \sin \frac{n\pi}{a} x dx.$$

Звідси

$$V_{mn} = \frac{V_0}{2} (\delta_{m,n+2} + \delta_{m,n-2}).$$

Отже, поправка до енергії першого порядку дорівнює нулю

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = 0.$$

У другому порядку

$$E_n^{(2)} = \frac{V_0^2}{2E_1^{(0)}} \frac{1}{n^2 - 4} \quad \text{при } n \neq 2.$$

116. Для частинки, що знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a ($0 < x < a$), знайти в першому порядку теорії збурень зміщення енергетичних рівнів під дією збурення виду (див. рисунок)

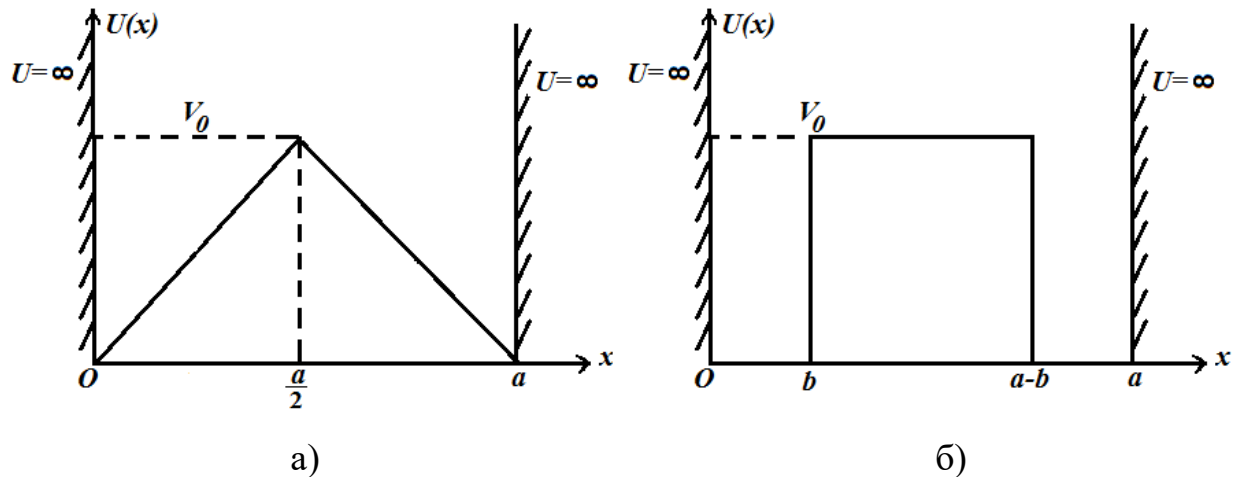


Рисунок до задачі 116.

а) $V(x) = \frac{V_0}{a} (a - |2x - a|);$

б) $V(x) = \begin{cases} V_0, & b < x < a - b \\ 0, & 0 < x < b, a - b < x < a \end{cases}$

Вказати умови застосовності отриманого результату.

Розв'язок.

Запишемо, як і в попередній задачі, власні функції і власні значення незбуреного гамільтоніана

$$\psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2ma^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Нескладне інтегрування дає:

а) $E_n^{(1)} = V_{nn} = V_0 \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1+(-1)^n}{\pi^2(n+1)^2} \right\};$

б) $E_n^{(1)} = V_{nn} = \frac{V_0}{a} \left\{ a - 2b + \frac{a}{\pi(n+1)} \sin \frac{2\pi(n+1)b}{a} \right\}.$

Умова застосовності теорії збурень $|V_{nm}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$, як легко бачити, приймає вигляд $|V_0| \ll \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} (n+1)$.

Це співвідношення означає, що при збуренні довільної величини зсув енергетичних рівнів з досить великим значенням n може бути розраховано з теорії збурень.

117. Знайти поправку до енергії основного стану лінійного гармонічного осцилятора за рахунок ангармонічного члена в потенціальній енергії

$$V(x) = \alpha x^3.$$

Розв'язок.

Нормовані власні функції незбуреного гамільтоніана гармонічного осцилятора мають вигляд

$$\psi_n^{(0)}(x) = (2^n \sqrt{\pi} a n!)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2\right] H_n\left(\frac{x}{a}\right), \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}) - \text{поліном Ерміта.} \quad (*)$$

Враховуючи рекурентне співвідношення для поліномів Ерміта

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0$$

і ортогональність власних функцій, неважко знайти матричні елементи координати x_{mn} , а з ними і матричні елементи збурення

$$x_{mn} = x_{nm} = a \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} H_m\left(\frac{x}{a}\right) \frac{x}{a} H_n\left(\frac{x}{a}\right) d\left(\frac{x}{a}\right) = \begin{cases} a \sqrt{\frac{n}{2}} & \text{для } m = n - 1 \\ \sqrt{\frac{n+1}{2}} & \text{для } m = n + 1 \\ 0 & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

Цей результат може бути записаний в наступному вигляді

$$x_{mn} = a \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n-1,m} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n+1,m} \right).$$

Внаслідок непарності підінтегральної функції у виразі

$$(x^3)_{nn} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n^{(0)}|^2 x^3 dx$$

отримаємо $(x^3)_{nn} = 0$. Таким чином, $E_n^{(1)} = V_{nn} = 0$.

Поправка до енергії в другому порядку від потенціалу збурення виявляється рівною

$$E_n^{(2)} = \frac{\alpha^2}{\hbar\omega} \sum_{k \neq n} \frac{|(x^3)_{nk}|^2}{n-k} = -\frac{15}{4} \alpha^2 \frac{\hbar^2}{m^3 \omega^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right).$$

Для поправки до енергії основного стану ($n = 0$) гармонічного осцилятора отримуємо:

$$\Delta E = -\frac{11}{8} \alpha^2 \frac{\hbar^2}{m^3 \omega^4}.$$

118. Обчислити поправку першого порядку до рівнів енергії гармонічного осцилятора при наявності збурення $V(x) = \varepsilon x^4$.

Відповідь: $E_n^{(1)} = \varepsilon (x^4)_{nn} = \frac{3}{2} \varepsilon \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right)$.

119. Знайти поправку до рівнів енергії атома водню за рахунок релятивістської залежності маси від швидкості. Врахувати, що член порядку $\frac{v^2}{c^2}$ в релятивістській формулі залежності $m(v)$ призводить до оператора збурення $\hat{V}_{\text{рел.}} = -\frac{1}{8m_0^3 c^2} \hat{p}^4$ (де $\hat{p}$ – оператор імпульсу).

Розв'язок.

Релятивістська поправка до енергетичних рівнів повинна бути обчислена за формулою

$$\Delta E_{\text{рел.}} = - \int \psi_j^* \frac{\hat{p}^4}{8m_0^3 c^2} \psi_j d\tau,$$

де j – сукупність трьох квантових чисел, а $\psi_j = \psi_j^{(0)}$.

Ефективний потенціал електрона в атомі водню дорівнює

$$V_{\text{еф.}} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} \quad (\text{СИ})$$

Природно, що $V_{\text{еф.}}$ 1s-електрона є

$$V_{\text{еф.}} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Рівняння Шредінгера для незбурених станів має вигляд

$$\frac{\hat{p}^2}{2m_0} \psi_j = \left(E_n^{(0)} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} \right) \psi_j.$$

З урахуванням останнього виразу нескладні, але досить громіздкі обчислення призводять до наступного результату

$$\Delta E_{\text{рел.}} = -\frac{\alpha^2 \hbar R}{n^4} \left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right),$$

де R – постійна Ридберга, $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ – стала тонкої структури.

120. Визначити ймовірність переходу зарядженого осцилятора з основного стану в збуджений під впливом раптово включеного однорідного електричного поля $\vec{E}_0$.

Розв'язок.

Потенціальну енергію осцилятора в однорідному електричному полі можна записати у вигляді:

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 - q|\vec{E}_0|x = \frac{m\omega^2}{2}(x - x_0)^2 + \text{const},$$

де $x_0 = \frac{q|\vec{E}_0|}{m\omega^2}$.

Цей вираз має вигляд енергії лінійного осцилятора зі зсунутим положенням рівноваги. Отже, хвильова функція збудженого осцилятора дорівнює $\psi_n(x - x_0)$, де $\psi_n(x)$ визначається формулами (*) (задача 117). Ймовірність переходу визначається коефіцієнтами розкладання збудженої функції в ряд по незбудованим функціям $\psi_k^{(0)}(x) = \psi_k(x)$:

$$a_k = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(x)\psi_0(x - x_0)dx = \frac{(-1)^k}{\sqrt{2^k k! \pi}} e^{-\frac{\xi_0^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi\xi_0} \frac{d^k}{d\xi^k} e^{-\xi^2 + 2\xi\xi_0} d\xi,$$

де $\xi_0 = \frac{x_0}{a} = \frac{q|\vec{E}_0|}{\sqrt{m\hbar\omega^3}}$, $\xi = \frac{x}{a}$.

Шляхом k -кратного інтегрування частинами інтеграл приводиться до вигляду

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2 + \xi\xi_0} d\xi = \sqrt{\pi} e^{\frac{\xi_0^2}{4}}.$$

У результаті для ймовірності переходу отримаємо:

$$W_{k0} = |a_k|^2 = \frac{\xi_0^{2k}}{2^k k!} e^{-\frac{\xi_0^2}{2}}.$$

121. Незбурена система має два близьких рівня енергії, відстань між якими порівняна з матричними елементами енергії, що збурює, між цими станами. Знайти поправку до енергії в першому наближенні.

Розв'язок.

Будемо шукати хвильову функцію в наступному вигляді:

$$\psi = C_1 \psi_1^{(0)} + C_2 \psi_2^{(0)}.$$

Тут $\psi_1^{(0)}$ и $\psi_2^{(0)}$ – хвильові функції обох станів без збурення. Ця хвильова функція буде описувати деякі нові два стани, в які вихідні стани перейдуть під впливом збурення. Підставимо цю функцію в рівняння для відшукування власних значень оператора $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}$:

$$\hat{H}\psi = (\hat{H}^{(0)} + \hat{V})(C_1 \psi_1^{(0)} + C_2 \psi_2^{(0)}) = E\psi = E(C_1 \psi_1^{(0)} + C_2 \psi_2^{(0)}).$$

Помножимо це рівняння один раз на $\psi_1^{(0)*}$ інший раз на $\psi_2^{(0)*}$ та проінтегруємо по всьому об'єму. Крім того, скористаємося тим, що $\hat{H}^{(0)}\psi_i^{(0)} = E_i^{(0)}\psi_i^{(0)}$, ортогональністю і нормуванням власних функцій. Отримаємо систему двох лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь:

$$(E_1^{(0)} + V_{11} - E)C_1 + V_{12}C_2 = 0,$$

$$V_{21}C_1 + (E_2^{(0)} + V_{22} - E)C_2 = 0.$$

Вона має розв'язок, якщо визначник, побудований з коефіцієнтів, дорівнює нулю:

$$E^2 - (E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + V_{11} + V_{22})E + (E_1^{(0)} + V_{11})(E_2^{(0)} + V_{22}) - |V_{12}|^2 = 0,$$

що дає два значення «збуреної» енергії:

$$E = \frac{1}{2}(E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + V_{11} + V_{22}) \pm \sqrt{\frac{(E_1^{(0)} + V_{11} - E_2^{(0)} - V_{22})^2}{4} + |V_{12}|^2}. \quad (*)$$

Якщо матричний елемент переходу V_{12} обертається в нуль, виходить звичайна формула для поправок до енергії в першому наближенні: до $E_1^{(0)}$ додається V_{11} , до $E_2^{(0)}$ додається V_{22} . За умовою задачі матричний елемент V_{12}

того ж порядку, що і $E_1^{(0)} - E_2^{(0)}$, так що рівні енергії істотно перебудовуються по відношенню до вихідного розташування.

122. Знайти функції ψ^+ і ψ^- для попередньої задачі, враховуючи, що $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$. (Знаки «+» і «-» відповідають знакам перед коренем у виразі (*) задачі 121). Скористатися позначенням:

$$\frac{2V_{12}}{E_1^{(0)} + V_{11} - E_2^{(0)} - V_{22}} \equiv -\operatorname{tg} \alpha e^{i\beta}.$$

Відповідь:

$$\psi^+ = \cos \frac{\alpha}{2} e^{\frac{i\beta}{2}} \psi_1^{(0)} - \sin \frac{\alpha}{2} e^{-i\frac{\beta}{2}} \psi_2^{(0)}$$

$$\psi^- = \sin \frac{\alpha}{2} e^{\frac{i\beta}{2}} \psi_1^{(0)} + \cos \frac{\alpha}{2} e^{-i\frac{\beta}{2}} \psi_2^{(0)}.$$

123. Розглянути два ідентичних лінійних осцилятора з коефіцієнтами пружності k . Потенціал взаємодії заданий виразом $H' = cx_1x_2$, де x_1 і x_2 – осциляторні змінні.

а) Знайти точні значення енергетичних рівнів.

б) Вважаючи, що $c \ll k$, визначити в першому порядку теорії збурень два нижні збуджені стани. (Енергії рівнів визначити в першому порядку, а власні функції – в нульовому порядку теорії збурень).

Розв'язок.

а) Повний гамільтоніан системи має вигляд

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \frac{k}{2} (x_1^2 + x_2^2) + cx_1x_2.$$

Ввівши нові змінні ξ, η , що визначаються співвідношеннями

$$x_1 = \frac{\xi + \eta}{\sqrt{2}}, \quad x_2 = \frac{\xi - \eta}{\sqrt{2}},$$

представимо гамільтоніан у вигляді

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) + \frac{1}{2} (k + c) \xi^2 + \frac{1}{2} (k - c) \eta^2.$$

Таким чином, точні значення енергетичних рівнів визначаються виразом $E =$

$$n_1 \hbar \omega_1 + n_2 \hbar \omega_2 + \frac{\hbar}{2} (\omega_1 + \omega_2),$$

де n_1 і n_2 - позитивні цілі числа, а

$$\omega_1^2 = \frac{k-c}{m}, \omega_2^2 = \frac{k+c}{m}.$$

б) Тепер, так як $c \ll k$, можна вважати H' збуренням. Незбурені власні функції мають вигляд

$$|n_1 n_2\rangle = U_{n_1}(x_1)U_{n_2}(x_2),$$

де U – хвильові функції простого гармонічного осцилятора з енергетичними рівнями

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1),$$

де $\omega^2 = \frac{k}{m}$. Перший збуджений стан з енергією $2\hbar\omega$ дворазово вироджений.

Цей стан відповідає $(n_1, n_2) = (1, 0)$ або $(0, 1)$.

Матриця гамільтоніана збурення, взята по відношенню до незбурених станів, дорівнює

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix},$$

де

$$a = \langle 10|H'|01\rangle = c\langle 0|x_1|1\rangle\langle 1|x_2|0\rangle.$$

Замість того щоб визначити a обчисленням інтеграла $\int xU_1U_0dx$, представимо a наступним чином:

$$a = c\langle 0|x|1\rangle\langle 1|x|0\rangle = c\langle 0|x^2|0\rangle.$$

Це дійсно так, оскільки $\langle n|x|0\rangle \neq 0$, тільки якщо $n = 1$. Отже, умова повноти $\sum |n\rangle\langle n| = 1$ приводить до рівності

$$\langle 0|x^2|0\rangle = \sum_n \langle 0|x|n\rangle\langle n|x|0\rangle = \langle 0|x|1\rangle\langle 1|x|0\rangle.$$

Матричний елемент x^2 може бути виведений з того відомого факту, згідно з яким середнє значення потенціальної енергії дорівнює половині повної енергії.

Таким чином, $\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{2}{k} \cdot \frac{1}{4} \hbar\omega$.

Остаточні енергетичні стани, які відповідають хвильовим функціям

$$\psi^\pm = \frac{|10\rangle \pm |01\rangle}{\sqrt{2}},$$

дорівнюють $2\hbar\omega\left(1 \pm \frac{c}{4k}\right)$ в першому порядку по c . Зауважимо, що ці значення дорівнюють відповідним першим членам розкладання точного розв'язку по c .

124. Визначити рівні енергії лінійного гармонічного осцилятора з умови (7.15).

Розв'язок.

Для лінійного гармонічного осцилятора імпульс має вигляд

$$p(x) = \sqrt{2m\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)},$$

а точки повороту

$$x_{1,2} = \mp \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}.$$

Таким чином, умова (7.15) запишеться у вигляді

$$2 \int_{-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}}^{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} \sqrt{2m\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)} dx = 2m\omega \int_{-a}^a \sqrt{a^2 - x^2} dx = h\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

де введено позначення $\frac{2E}{m\omega^2} = a^2$.

У результаті простого інтегрування отримуємо $2\pi \frac{E}{\omega} = h\left(n + \frac{1}{2}\right)$,

звідси $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

125. Квазікласичним методом знайти енергетичний спектр частинки масою m , яка рухається в полі з потенціальною енергією

$$U(x) = -U_0\left(1 - \frac{|x|}{a}\right) \text{ при } E < 0.$$

Розв'язок.

На підставі умови квантування Бора-Зоммерфельда $\oint p dx = h\left(n + \frac{1}{2}\right)$ і

враховуючи, що $p = \sqrt{2m\left(U_0 + E - \frac{U_0}{a}|x|\right)}$, отримаємо в результаті

інтегрування $E_n = -U_0 + \alpha\left(n + \frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}$, де $n = 0, 1, 2, \dots, N$, $\alpha = \left(\frac{3\pi\hbar U_0}{4\sqrt{2ma}}\right)^{\frac{2}{3}}$.

Максимальне n , яке визначається з умови $E_N = 0$, дорівнює $N = \left(\frac{U_0}{\alpha}\right)^{3/2} - \frac{1}{2}$.

126. Для потенціалу $V = -\frac{V_0}{ch^2 \frac{x}{a}}$ визначити в квазікласичному наближенні рівні енергії і повне число дискретних рівнів.

Розв'язок.

Рівні енергії E_n визначаються з правила квантування Бора-Зоммерфельда

$$\int_{x_1}^{x_2} p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1)$$

$$\text{де } p = \sqrt{2m \left(E_n + \frac{V_0}{ch^2 \frac{x}{a}} \right)},$$

x_1 і x_2 – точки повороту, що визначаються з умови $p = 0$ (при цьому $E_n < 0$ для випадку дискретного спектру). Для обчислення інтегралу

$$J(E) = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \left(E + \frac{V_0}{ch^2 \frac{x}{a}} \right)} dx,$$

диференціюємо обидві частини по E . При цьому похідна від інтеграла по верхній і нижній межах звертається в нуль, так як в точках x_1 і x_2 підкореневий вираз дорівнює нулю.

Таким чином,

$$\frac{dJ}{dE} = m \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{2m \left(E + \frac{V_0}{ch^2 \frac{x}{a}} \right)}}.$$

Заміною змінної $sh \frac{x}{a} = z$ останній інтеграл приводиться до виду:

$$\frac{dJ}{dE} = ma \int_{z_1}^{z_2} \frac{dz}{\sqrt{2m[E(1+z^2)+V_0]}} = \frac{ma}{\sqrt{-2mE}} \pi.$$

Звідси знаходимо

$$J(E) = -\sqrt{-2ma^2 E} \pi + C.$$

Постійна C визначається з того, що при $E = -V_0$ область інтегрування стягується в точку і

$$J(-V_0) = 0,$$

Звідси

$$J(E) = \sqrt{2ma^2} (\sqrt{V_0} - \sqrt{-E}) \pi.$$

Таким чином, в квазікласичному наближенні рівні енергії визначаються наступним виразом:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[\sqrt{\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2 \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (2)$$

Число рівнів $N = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} a$. Зазначимо, що обчислення рівнів енергії за допомогою правила квантування (1) є законним, якщо число рівнів велике, тобто

$$\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \gg 1.$$

127. Визначити в квазікласичному наближенні середнє значення кінетичної енергії стаціонарного стану.

Розв'язок.

Середнє значення кінетичної енергії в стаціонарному стані ψ_n (хвильова функція передбачається дійсною)

$$\bar{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi_n \frac{d^2\psi_n}{dx^2} dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int \left(\frac{d\psi_n}{dx}\right)^2 dx.$$

У квазікласичному наближенні в класично доступній області ($a < x < b$) хвильова функція має вигляд

$$\psi_n = \frac{A_n}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4}\right), \quad p = \sqrt{2m(E_n - V)},$$

звідси

$$\frac{d\psi_n}{dx} = -\frac{\sqrt{p}}{\hbar} A_n \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{1}{2} \frac{A_n}{p^{3/2}} \frac{dp}{dx} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4}\right).$$

При підстановці цього виразу в інтеграл, що визначає $\bar{T}$, межі інтегрування можна обмежити класично доступною областю, тому що поза цією областю ψ_n експоненціально убуває. Замінюючи квадрати сильно осцилюючих тригонометричних функцій на їх середнє значення $1/2$ і нехтуючи інтегралом, що містить осцилюючий множник

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4}\right) \cdot \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2} \sin\left(\frac{2}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{2}\right),$$

отримаємо

$$\bar{T} = \frac{A_n^2}{4m} \int_a^b \left[p + \frac{\hbar^2}{4p^3} \left(\frac{dp}{dx} \right)^2 \right] dx.$$

Умова застосовності квазікласичного наближення $\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| = \frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1$ означає, що другий член під знаком інтеграла малий у порівнянні з першим, тому, скориставшись умовою квантування, знаходимо:

$$\bar{T} = \frac{A_n^2}{4m} \int_a^b p dx = \frac{A_n^2}{4m} \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Стала A_n визначається з умови нормування

$$\int \psi_n^2 dx \approx A_n^2 \int_a^b \frac{1}{p} \cos^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4} \right) dx \approx \frac{A_n^2}{2} \int_a^b \frac{dx}{p} = 1.$$

З іншого боку, диференціюючи умови квантування

$$\int_a^b p dx = \int_a^b \sqrt{2m(E_n - V)} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

по n , отримуємо

$$m \frac{dE_n}{dn} \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2m(E_n - V)}} = m \frac{dE_n}{dn} \int_a^b \frac{dx}{p} = \pi \hbar,$$

звідки

$$A_n^2 = \frac{2m}{\pi \hbar} \frac{dE_n}{dn}.$$

Вираз для середньої кінетичної енергії після підстановки останньої рівності приймає вигляд

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \frac{dE_n}{dn} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

128. Визначити вид потенціальної енергії $V(x)$ за енергетичним спектром E_n в квазікласичному наближенні. $V(x)$ вважати парною функцією $V(x) = V(-x)$, монотонно зростаючою при $x > 0$.

Розв'язок.

Будемо виходити з умови квантування Бора-Зоммерфельда

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[E - V(x)]} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Це рівняння визначає спектр, точніше $n(E)$, якщо задана потенціальна енергія $V(x)$. Оскільки за умовою $V(x)$ – парна функція,

$$2 \int_0^a \sqrt{2m[E - V(x)]} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

де $x_2 = -x_1 = a$, $E = V(a)$.

Задача, таким чином, зводиться до відшукування розв'язку інтегрального рівняння, яке має вигляд

$$x(V) = \frac{\hbar}{2m} \int_{E_0}^V \frac{dE}{\frac{dE}{dn} \sqrt{V-E}},$$

де $x(V)$ – функція зворотна $V(x)$, а $\frac{dE}{dn}$ розглядається як функція E ; E_0 – початок відліку енергії.

(Дана задача тісно пов'язана з наступною задачею класичної механіки: визначити потенційну енергію частинки по періоду її коливань, заданому як функція енергії (див. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика, т. I Механика. М.: Наука, 1973, де в § 12 дано розв'язок цієї задачі)).

129. Частинка знаходиться в центральному полі $U(r) = -\alpha r^{-\nu}$; $\alpha > 0$, $\nu > 0$. Визначити, в якій області простору розв'язок рівняння Шредінгера для s-стану з енергією $E = 0$ має квазікласичні вигляд.

Розв'язок.

Рівняння Шредінгера при $E = 0$ для s-стану ($l = 0$) має вигляд $\left(\psi = \frac{\kappa(r)}{r}\right)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \kappa}{dr^2} - \frac{\alpha}{r^\nu} \kappa = 0.$$

Розв'язання цього рівняння мають квазікласичний вигляд при виконанні умови

$$\hbar \left| \frac{d}{dr} \frac{1}{p(r)} \right| = \frac{\hbar \nu}{2\sqrt{2m\alpha}} r^{\frac{(\nu-2)}{2}} \ll 1.$$

Для $\nu > 2$ ця умова виконана при $r \ll \left(\frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar \nu}\right)^{\frac{2}{\nu-2}}$, тобто квазікласика застосовна лише на малих відстанях; при $\nu < 2$, навпаки, квазікласика застосовна на великих відстанях $r \gg \left(\frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar \nu}\right)^{-\frac{2}{2-\nu}}$. У разі $\nu = 2$ при виконанні умови $\sqrt{m\alpha} \gg \hbar$ розв'язання рівняння Шредінгера має квазікласичний вид у всьому просторі; при $\sqrt{m\alpha} \lesssim \hbar$ квазікласика взагалі непридатна.

130. Оцінити в квазікласичному наближенні коефіцієнт прозорості бар'єра виду

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0 \left(1 - \frac{x}{a}\right), & x > 0 \end{cases}$$

Розв'язок.

Стандартна формула для коефіцієнта прозорості бар'єра в квазікласичному наближенні

$$\mathcal{D} \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx \right] = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2m \left(U_0 - E - U_0 \frac{x}{a} \right)} dx \right] \quad (1)$$

в розглянутій задачі безпосередньо не застосовна, тому що в околиці лівої точки повороту $x = 0$ порушуються умови зшивання квазікласичних рішень, використані при виведенні (1). Проте формулу (1) можна використовувати для оцінки коефіцієнта прозорості. Елементарне інтегрування дає

$$\mathcal{D} \sim \exp \left[-\frac{4a\sqrt{2m}}{3U_0\hbar} (U_0 - E)^{3/2} \right] \quad (2)$$

Вираз (2) визначає коефіцієнт прозорості лише по порядку величини (або, як кажуть, з точністю до предекспоненціального множника, який при $E \sim U_0$ має величину порядку одиниці; слід однак мати на увазі, що при $E \rightarrow 0$ цей множник, як можна показати, обертається в нуль). Однак у випадку, коли під знаком експоненти в цьому виразі стоїть велике за величиною негативне число, формула (2) правильно передає основне – експоненціальну малість коефіцієнта прозорості.

131. Визначити ймовірність виходу частинки з нульовим моментом кількості руху з центрально-симетричної потенціальної ями, зображеної на рисунку

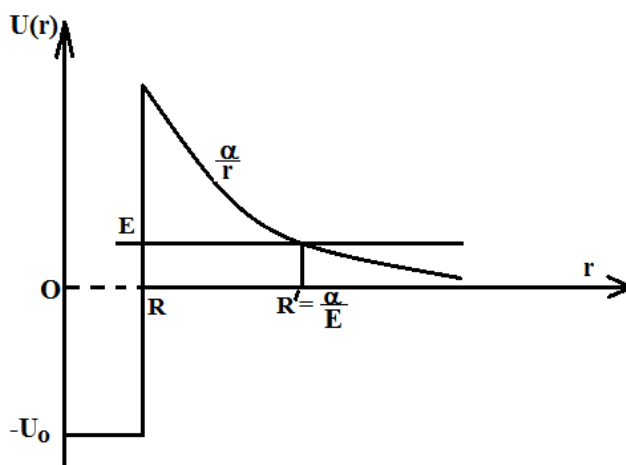


Рисунок до задачі 131. Потенціальна яма з кулонівським бар'єром.

Розв'язок.

Застосуємо квазікласичну формулу (1) (зад. 130) до радіального руху.

Отримаємо для шуканої ймовірності вираз:

$$W \sim \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_R^{\alpha/E} \sqrt{2m \left(\frac{\alpha}{r} - E \right)} dr \right\} = \\ = \exp \left\{ -\frac{2\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \left[\arccos \sqrt{\frac{ER}{\alpha}} - \sqrt{\frac{ER}{\alpha} \left(1 - \frac{ER}{\alpha} \right)} \right] \right\}.$$

У разі високого потенційного бар'єру (коли $U(R) \gg E$) ця формула переходить у вираз:

$$W \sim \exp \left\{ -\frac{\pi\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right\}.$$

132 У квазікласичному наближенні знайти коефіцієнт прозорості бар'єра

$$U(x) = \frac{U_0}{ch^2\left(\frac{x}{a}\right)}.$$

Розв'язок.

У виразі

$$\mathcal{D} \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx \right] = \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\frac{U_0}{Ech^2\left(\frac{x}{a}\right)} - 1} dx \right\} \quad (1)$$

інтеграл заміною змінної

$$sh\left(\frac{x}{a}\right) = \kappa \sin t, \quad \kappa = \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1},$$

приводиться до вигляду

$$2a\kappa^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos^2 t dt}{1 + \kappa^2 \sin^2 t} = \pi a (\sqrt{1 + \kappa^2} - 1) = \pi a \left(\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} - 1 \right),$$

і коефіцієнт прозорості виявляється рівним

$$\mathcal{D}(E) \approx \exp \left\{ -\frac{2\pi a}{\hbar} \sqrt{2m} (\sqrt{U_0} - \sqrt{E}) \right\} \quad (2)$$

Умова застосовності виразу (2) припускає $\mathcal{D} \ll 1$, тобто потрібно, щоб був великий модуль показника експоненти

$$\frac{2\pi a}{\hbar} \sqrt{2m} (\sqrt{U_0} - \sqrt{E}) \gg 1 \quad (3)$$

Крім цього є ще обмеження на енергію частинки E , так як при $E \rightarrow 0$ в околиці точок повороту порушуються стандартні умови зшивання квазікласичних рішень, що призводять до виразу (1) для прозорості бар'єру. Уважний аналіз показує, що зазначене обмеження має вигляд

$$\sqrt{E} \gg \sqrt{\frac{\hbar^2}{ma^2}}. \quad (4)$$

133. Проекція спіна електрона на вісь Z з достовірністю має значення $+\frac{1}{2}$. Яка ймовірність того, що проекція спіна на напрям Z' , що складає кут Θ з віссю Z , буде мати значення $+\frac{1}{2}$ і $-\frac{1}{2}$? Визначити середнє значення проекції спіна на зазначений напрямок.

Відповідь: Шуканий розв'язок має відповідати умові задачі:

$W_z\left(+\frac{1}{2}\right) = 1, W_z\left(-\frac{1}{2}\right) = 0$ при $\Theta = 0$. Таким розв'язком є

$$W_{z'}\left(+\frac{1}{2}\right) = \cos^2 \frac{\Theta}{2}, W_{z'}\left(-\frac{1}{2}\right) = \sin^2 \frac{\Theta}{2}.$$

Середнє значення проекції спіна дорівнює

$$\bar{S}_z = \frac{1}{2} W_{z'}\left(+\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2} W_{z'}\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \cos \Theta.$$

134. Показати, що матриці Паулі можна розглядати як компоненти векторного оператора $\hat{\vec{\sigma}}$, для якого справедливі співвідношення

$$[\hat{\vec{\sigma}} \hat{\vec{\sigma}}] = 2i\hat{\vec{\sigma}}, (\hat{\vec{\sigma}} \hat{\vec{\sigma}}) = 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \text{ Знайти також добуток } \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z.$$

Відповідь: $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$

135. Для частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$ знайти з розв'язку задачі на власні функції і власні значення спінові функції ψ_{s_i} ($i = 1, 2, 3$), що описують стан частинки з певною проекцією спіна на осі X, Y, Z системи координат.

Розв'язок.

Власні функції $\psi_{s_x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ і власні значення s_x оператора $\hat{s}_x = \frac{\hat{\sigma}_x}{2}$ знаходяться з розв'язку рівняння

$$\hat{s}_x \psi_{s_x} = s_x \psi_{s_x};$$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

звідки

$$b = 2s_x a, a = 2s_x b \quad (1)$$

Нетривіальний розв'язок системи рівнянь (1) існує тільки за умови $4s_x^2 = 1$, що визначає можливі значення (спектр) величини $s_x = \pm \frac{1}{2}$. З (1) маємо: $a = b$ при $s_x = \frac{1}{2}$ і $a = -b$ при $s_x = -\frac{1}{2}$.

Нормовані на одиницю $|\psi_{s_x}|^2 = |a|^2 + |b|^2 = 1$ власні функції ψ_{s_x} мають вид

$$\psi_{s_x=+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \psi_{s_x=-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Аналогічно знаходимо

$$\psi_{s_y=+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \psi_{s_y=-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix},$$

$$\psi_{s_z=+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_{s_z=-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

136. Знайти власні значення оператора $\hat{f} = a + (\vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}})$ (a – число, $\vec{b}$ – звичайний вектор, $\hat{\vec{\sigma}}(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$, де $\hat{\sigma}_i$ – матриці Паулі).

Відповідь: Оператор має два власних значення, що дорівнюють $f_{1,2} = a \pm b$.

137. Чи можуть квадрати проекцій електронного спіна на осі X, Y, Z мати одночасно визначені значення?

Розв'язок.

Так як проекція спіна на будь-яку вісь приймає лише два значення, рівні $\pm 1/2$, то квадрат проекції спіна (на будь-яку вісь) в довільному стані завжди має певне значення $1/4$.

138. Знайти власні значення скалярного добутку $(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)$ для двох електронів, користуючись тим, що $\hat{\sigma}_1$ і $\hat{\sigma}_2$ перестановочні.

Розв'язок.

Оскільки $\hat{\sigma}_1$ і $\hat{\sigma}_2$ перестановочні, для квадрата суми має місце звичайна формула

$$(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)^2 = \hat{\sigma}_1^2 + \hat{\sigma}_2^2 + 2(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2).$$

Відомо, що сума двох моментів змінюється від їх суми до різниці, так що сумарний спі́н приймає значення 1 і 0 (за найбільшою проекцією). Оскільки $\hat{\sigma}$ – подвоєний оператор спінового моменту, відповідні максимальні проекції всі удвічі більше. Тому, коли спіни складаються як паралельні вектори, власне значення квадрата $(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)^2$ вчетверо більше, ніж відповідного квадрата моменту, тобто дорівнює $4 \cdot 1 \cdot 2 = 8$, коли ж спіни антипаралельні, воно дорівнює 0. Далі, $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1$, так що власне значення $(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)$ є $\frac{8-6}{2} = 1$ при паралельних спінах і $\frac{0-6}{2} = -3$ при антипаралельних спінах.

139. Для спіна $s = \frac{1}{2}$ вказати вид підвищувального і понижувального операторів $\hat{s}_{\pm}$ і розглянути їх дію на власні функції ψ_{s_z} . Які є оператори $\hat{s}_{\pm}^2$?

Відповідь: $\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{s}_- = \hat{s}_x - i\hat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{s}_+^2 = \hat{s}_-^2 = 0$.

140. В однорідному магнітному полі, паралельному осі Z , знаходиться електрон. Вимірювання показали, що в момент $t = 0$ спі́н електрона був спрямований по осі X . Провести квантовомеханічний розрахунок ймовірності того, що в момент $t > 0$ електрон буде в стані

а) з $s_x = \frac{1}{2}$; б) з $s_y = -\frac{1}{2}$; в) з $s_z = \frac{1}{2}$.

Розв'язок.

В якості гамільтоніана електрона візьмемо $\hat{H} = \mu_0 B \hat{\sigma}_z$, де μ_0 – магнітний момент електрона, B – індукція магнітного поля.

Спінова хвильова функція задовольняє рівнянню

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \text{ де } \psi = \frac{1}{\sqrt{2}} A(t) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} C(t) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ (див. зад. 135)}$$

A і C повинні бути визначені так, щоб $A(0) = e^{i\delta}$, $C(0) = 0$. Тільки в цьому випадку в момент $t = 0$ спі́н електрона буде знаходитися у власному стані з $s_x = \frac{1}{2}$. З рівнянь руху отримаємо $i\dot{A}(t) = \frac{\mu_0 B}{\hbar} C(t)$ та $i\dot{C}(t) = \frac{\mu_0 B}{\hbar} A(t)$, підходящим розв'язком яких є

$$A(t) = e^{i\delta} \cos \frac{\mu_0 B}{\hbar} t,$$

$$C(t) = -ie^{i\delta} \sin \frac{\mu_0 B}{\hbar} t.$$

Таким чином, ймовірність того, що а) $s_x = \frac{1}{2}$; б) $s_y = -\frac{1}{2}$; в) $s_z = \frac{1}{2}$ дорівнює відповідно: а) $P_+ = |A(t)|^2 = \cos^2 \left(\frac{\mu_0 B}{\hbar} t \right)$; б) $P_- = |C(t)|^2 = \sin^2 \left(\frac{\mu_0 B}{\hbar} t \right)$; в) $P = \frac{1}{2}$.

141. Показати, що в однорідному магнітному полі, змінному в часі, хвильова функція частинки зі спіном розпадається на добуток координатної і спінової функцій.

Розв'язок.

Будемо виходити з нестационарного рівняння Паулі для нерелятивістської частинки зі спіном $1/2$, що рухається в електромагнітному полі. Воно має вигляд

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hat{H}_0 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - \mu_0 (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\mathcal{H}}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

де $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + eU$, U і $\vec{A}$ – скалярний і векторний потенціали електромагнітного поля, μ_0 – магнітний момент частинки, $\vec{\mathcal{H}} = \text{rot} \vec{A}$ – напруженість магнітного поля.

Будемо шукати хвильову функцію у вигляді

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \varphi(x, y, z, t) \begin{pmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{pmatrix}.$$

Тут функція φ є розв'язком рівняння

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}_0 \varphi.$$

Тоді для спінової функції $\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$ отримаємо рівняння

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} = -\mu_0 (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\mathcal{H}}) \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}.$$

Зауваження. У задачах 140 і 141 використані різні системи одиниць.

142. Обчислити оператор $\frac{d\hat{\sigma}_x}{dt}$, використовуючи гамільтоніан частинки зі спіном, що знаходиться в магнітному полі з індукцією $\vec{B}$.

Вказівка. Виходити з рівняння Гейзенберга

$$\frac{d\hat{L}(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{L}(t)}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{L}(t)],$$

де $[\hat{H}, \hat{L}(t)] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L})$ – квантова дужка Пуассона.

У нашій задачі $\hat{L}(t) = \hat{\sigma}_x(t)$, $\frac{\partial \hat{\sigma}_x(t)}{\partial t} = 0$.

Гамільтоніан $\hat{H} = \hat{H}_0 - \mu_0 (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{B})$, μ_0 – магнітний момент частинки. Однак $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2$ для задачі не відіграє ролі, оскільки $\hat{\sigma}_x$ комутує з $\hat{H}_0$.

Відповідь: $\frac{d\hat{\sigma}_x}{dt} = \frac{e}{m} (\hat{\sigma}_y B_z - \hat{\sigma}_z B_y)$.

ПИТАННЯ ДЛЯ САМОКОНТРОЛЮ

РОЗДІЛ I. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ ТА ДЕЯКІ МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ РІШЕННЯ ЇЇ ПРИКЛАДНИХ ЗАДАЧ

1. У чому полягає загальне визначення оператора?
2. Які оператори є лінійними та самоспряженими? Чому саме такі оператори застосовуються у квантовій механіці?
3. Як виглядає загальне рівняння на власні функції та власні значення оператора $\hat{A}$?
4. Покажіть, що оператор $I(\hat{A}^+ - \hat{A})$ ермітов для довільного оператора $\hat{A}$.
5. Запишіть умову ортонормування власних функцій квантової механіки.
6. В чому полягає діраківський формалізм?
7. Яким чином здійснюється перехід з одного представлення до другого у квантовій механіці?
8. Який вигляд має рівняння Шредінгера у матричній формі?
9. У чому полягає гіпотеза спіну?
10. Запишіть матриці Паулі та вираз для спінора.
11. Як кантується енергія квантового гармонічного осцилятора?
12. Що таке нульова енергія осцилятора і які фізичні підстави для її існування?
13. В чому полягає сенс операторів випромінювання та поглинання?
14. З якою метою розвинуто теорію збурень у квантовій механіці? У чому вона полягає?
15. Який вигляд мають поправки першого та другого порядку до енергії та коефіцієнтів розкладу хвильової функції?

РОЗДІЛ II. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА ТА ЙОГО ЗАСТОСУВАННЯ ДО РІШЕННЯ ДЕЯКИХ ОДНОМІРНИХ ЗАДАЧ. ТОТОЖНІ ЧАСТИНКИ

1. Який вигляд має повне рівняння Шредінгера?
2. Наведіть вираз для хвильової функції у разі, коли гамільтоніан не залежить явно від часу.
3. Сформулюйте імовірнісну інтерпретацію хвильової функції, що залежить від часу.
4. В яких випадках стан квантово-механічної системи треба описувати за допомогою матриці густини? Який її вигляд у найпростішому випадку?
5. Роз'ясніть поняття потенціальної ями та потенціального бар'єру.
6. Який вигляд має коефіцієнт прозорості прямокутного потенціального бар'єру кінцевої ширини? Довільної форми?
7. Які частинки називають тотожними?
8. У чому полягає принцип квантової нерозрізнимості тотожних частинок?

9. Симетричні та антисиметричні хвильові функції. Яке відношення має ця класифікація до поділу частинок на бозони та ферміони?
10. Який вигляд мають електромагнітні оператори народження та знищення?
11. Що таке коефіцієнти Ейнштейна? У чому зміст елементарної теорії чорного випромінювання Ейнштейна?

РОЗДІЛ III. ДЕЯКІ ПИТАННЯ КВАНТОВОЇ ЕЛЕКТРОНІКИ ТА КВАНТОВОЇ МАКРОФІЗИКИ

1. Який вигляд має гамільтоніан зарядженої частинки у довільному електромагнітному полі?
2. У чому полягає сутність методу вторинного квантування?
3. Що таке числа заповнення?
4. Яку хвильову функцію називають вторинно квантованою?
5. Як ви розумієте ідеалізацію дворівневої системи?
6. Чи можна спин вважати дворівневою системою? Який засіб математичного опису такої системи?
7. У чому полягає явище надпровідності?
8. Які ефекти притаманні явищу надпровідності?
9. Запишіть рівняння Лондонів і поясніть його зміст.
10. Як виглядає формула квантування магнітного потоку?

ЛІТЕРАТУРА

1. Дирак П. Принципы квантовой механики / П. Дирак. – М. : Наука, 1979, – 480 с.
2. Мессиа А. Квантовая механика. Т. 1 / А. Мессиа. – М. : Наука, 1978. – 478 с.
3. Мессиа А. Квантовая механика. Т. 2 / А. Мессиа. – М. : Наука, 1979. – 583 с.
4. Вакарчук І. О. Квантова механіка / Вакарчук І. О. – Львів : ЛНУ, 2004. – 783 с.
5. Бом Д. Квантова теорія / Д. Бом. – М. : Гос из-во физ-мат л-ры, 1961. – 728 с.
6. Фок В. А. Начала квантовой механики / Фок В. А. – М. : Наука, 1976. – 376 с.
7. Кемпфер Ф. Основные положения квантовой механики / Ф. Кемпфер. – М. : Мир, 1967. – 391 с.
8. . Юхновський І. Р. Квантова механіка / І. Р. Юхновський . – К.: Либідь, 1995. – 559 с.
9. Клубіс Я. Д., Шкатуляк Н. М. Збірник задач з електродинаміки. Навчальний посібник. 2-е вид.:доп., перероб. / Я. Д. Клубіс, Н. М. Шкатуляк. – Одеса: Фенікс, 2014. – 284 с.
10. Клубіс Я. Д., Шкатуляк Н. М. Обов'язковий мінімум задач з квантової механіки / Я. Д. Клубіс, Н. М. Шкатуляк. – Одеса: Фенікс, 2016. – 116 с.